

TESIS CARRERA DE DOCTORADO EN FÍSICA

**PROPIEDADES ÓPTICAS Y DE TRANSPORTE EN
ARREGLOS DE PUNTOS CUÁNTICOS**

Jhon Alejandro Andrade Hoyos
Doctorando

Dr. Pablo Cornaglia
Director

Miembros del Jurado

Dr. Anibal Iucci (Instituto de Física La Plata)
Dra. Karen Hallberg (Instituto Balseiro)
Dr. Axel Bruchhausen (Instituto Balseiro)

marzo de 2017

División teoría de la materia condensada – Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

A mi querida esposa y a mi adorada hija.

A mis padres y a mi abuela.

A mis hermanos.

Índice de contenidos

Índice de contenidos	iii
Índice de figuras	vii
Resumen	xv
Abstract	xvii
1. Introducción	1
1.1. Puntos cuánticos y bloqueo de Coulomb	1
1.2. Efecto Kondo	4
1.3. Modelo de Anderson y efecto Kondo en puntos cuánticos	5
1.4. Efecto Kondo subapantallado y ferromagnético	7
1.5. Ecuaciones de transporte en puntos cuánticos	8
1.6. Excitón y trión en puntos cuánticos	9
1.7. Catástrofe de ortogonalidad de Anderson	10
1.8. Grupo de renormalización numérica y su implementación	11
1.9. Organización de la tesis	18
2. Transporte a través de dos puntos cuánticos acoplados lateralmente	21
2.1. Introducción	21
2.2. Modelo	23
2.3. Resultados perturbativos en el régimen de acoplamiento débil	25
2.4. Resultados exactos a temperatura cero	29
2.5. Resultados numéricos	30
2.6. Efecto Kondo en puntos cuánticos multinivel	36
2.6.1. Teoría de campo medio (bosones esclavos)	40
3. Efecto Kondo subapantallado y ferromagnético en arreglos de puntos cuánticos	43
3.1. Introducción	43
3.2. Modelo	44

3.3. Hamiltonianos a baja energía	45
3.3.1. Impureza desacoplada de los conductores	45
3.3.2. Hamiltoniano de Kondo ferromagnético	47
3.3.3. Prueba de $J_K < 0$	49
3.3.4. Régimen del efecto Kondo en dos etapas	50
3.4. Resultados numéricos	51
3.4.1. Cruce desde el efecto Kondo ferromagnético al subapantallado ($N = 2$)	52
3.4.2. Dependencia de las propiedades a baja energía con el número de PCs laterales	55
4. Filtro de espín y poder termoeléctrico en dispositivos de múltiples puntos cuánticos	59
4.1. Introducción	59
4.2. Modelo	60
4.3. Propiedades de transporte	61
4.3.1. Conductancia	61
4.3.2. Poder termoeléctrico	63
4.4. Coeficiente Seebeck de espín y corriente de polarización de espín	64
5. Dinámica de muchos cuerpos en el decaimiento de un trión y de ex- citones de diferentes cargas en un punto cuántico	69
5.1. Introducción	69
5.1.1. Montaje y resultados experimentales	70
5.2. Modelo	72
5.3. Resultados	74
5.3.1. Modelo molecular	74
5.3.2. Cálculos NRG-FDM sin campo magnético	75
5.3.3. Cálculos NRG-FDM con campo magnético	78
6. Conclusiones	83
6.1. Generales	83
6.2. Capítulo 2	84
6.3. Capítulo 3	85
6.4. Capítulo 4	86
6.5. Capítulo 5	87
A. Reglas de suma de Friedel	91

B. Tratamiento con bosones esclavos	95
B.1. Deducción del Hamiltoniano efectivo para un sistema con simetría $SU(N)$, y solución de las ecuaciones de movimiento	95
B.2. Ecuaciones de movimiento con integrales de camino	99
Bibliografía	103
Publicaciones asociadas	119
Agradecimientos	121

Índice de figuras

1.1. Imagen MEB de un punto cuántico definido por cinco compuertas metálicas (color amarillo) fabricadas sobre una heteroestructura de GaAs /AlGaAs en cuya interfaz reside un gas de electrones bidimensional (color rojo). El punto cuántico está en el centro de la figura, y en cada extremo vive un mar de Fermi o gas de electrones conectado eléctricamente al punto cuántico (contactos derecho e izquierdo). Figura tomada de la Ref. [1].	1
1.2. Esquema del efecto de bloqueo de Coulomb a temperaturas mayores al acoplamiento entre el PC y los contactos y menores al espaciamiento entre niveles. La conductancia G es alta para voltajes (por ejemplo V_{g1} en la figura) donde un nivel del punto cuántico coincide con el nivel de Fermi de los contactos. Para otros voltajes, la conductancia es suprimida por la falta de densidad de estados en el punto cuántico. En la figura el pico de la izquierda corresponde a un nivel con un solo electrón, y el de la derecha al doblemente ocupado el cual tiene que pagar la energía de interacción U	2
1.3. a) Densidad espectral de un punto cuántico. Se evidencian dos picos de Coulomb en ε_d y $\varepsilon_d + U$ ensanchados una cantidad Δ debido a la hibridación con el gas de Fermi, y un pico resonante de Kondo en el nivel de Fermi producido por la alta correlación entre los electrones del gas de Fermi y un electrón en el punto cuántico. b) Dependencia de la conductancia G con la temperatura T . Por debajo de una temperatura T_K la conductancia es alta en el régimen de bloqueo de Coulomb, debido al nivel resonante de Kondo.	6

- 1.4. Esquema de la formación de un trión y un excitón por absorción de un fotón polarizado circularmente a la derecha de espín $L_f^z = 1$. Aquí ε_e es la energía del nivel de conducción, ε_v es la energía del nivel superior de valencia (proyección del momento angular total $\pm 3/2$), U_{ee} es el potencial repulsivo entre dos electrones en el nivel de conducción, U_{eh} es el potencial atractivo entre los electrones del nivel de conducción y un hueco en el nivel superior de valencia, y $\varepsilon'_e = \varepsilon_e - U_{eh}$. a) Formación de un trión. b) Formación de un excitón. 9
- 1.5. Pasos iniciales del método NRG para una impureza de Anderson (círculo lleno) acoplada a una banda de conducción continua por medio de la función de hibridación $\Delta(\omega)$. a) se introduce una discretización logarítmica en la banda de conducción a través del parámetro de discretización Λ . b) El espectro continuo para cada intervalo, es aproximado con un solo nivel. c) Se mapea el espectro discreto en una cadena semi-infinita con la impureza acoplada con el primer sitio por medio del acoplamiento túnel V . Los parámetros de energía de sitio ε_n y el acoplamiento entre sitios vecinos t_n son calculados en el mapeo usando un método de tridiagonalización. La figura fue tomada de la referencia [1]. 12
- 1.6. Susceptibilidad magnética o momento magnético al cuadrado en función de la temperatura para el modelo de Anderson. Se presentan tres zonas, la zona *A* que evidencia el punto fijo de OL, la zona *B* evidencia el punto fijo de ML y la zona *C* evidencia el punto fijo de AF. La línea entrecortada es una curva de susceptibilidad universal, y la flecha marca la temperatura de Kondo. Esta figura fue sacada de la referencia [2]. . . 14
- 2.1. Representación esquemática del dispositivo de doble puntos cuánticos acoplados lateralmente. El PC *a* está acoplado a los electrodos metálicos izquierdo (*I*) y derecho (*D*). Los orbitales del PC *b* están acoplados al PC *a* a través de una barrera túnel. 21

- 2.2. A) Imagen MEB del dispositivo. Los PCs están marcados con un color celeste. El acoplamiento túnel entre PCs se controla por medio de las compuertas amarillas. Todos los contactos ohmicos están al mismo potencial (V_0) a excepción del conductor superior del PC pequeño donde se aplica un voltaje de polarización V_{bias} . Las energías y las ocupaciones de cada PC se cambian a través de las compuertas verdes al aplicarles un voltaje de compuerta V_{gd} para el PC pequeño y V_{gD} para el PC grande. B) Diagrama de estabilidad cuando el acoplamiento entre PCs es débil (temperatura a 30mK). Se dibuja la conductancia diferencial con respecto a los voltajes de compuerta V_{gd} y V_{gD} . C) Diagrama de estabilidad cuando el acoplamiento entre PCs es fuerte. A temperaturas tan bajas, se encuentra un patrón de conductancia compleja. Figura sacada de los experimentos de Baines et al [3]. 22
- 2.3. Panel izquierdo: mapa de conductancia para un dispositivo de DPC acoplados lateralmente. El acoplamiento entre PCs es $t_{ab} = 0,01\text{meV}$. Los otros parámetros son $U_b = 0,25\text{meV}$, $U_a = 0,7\text{meV}$, $U_{ab} = 0,1\text{meV}$, $\delta = 0,02\text{meV}$, y $k_B T = 0,01\text{meV}$. Panel derecho: carga total del DPC aislado para los mismos parámetros y compuertas de voltaje como en el mapa de conductancia del panel izquierdo. Las líneas indican un cambio en un electrón en la carga del estado base del DPC aislado. El DPC está vacío en la esquina izquierda inferior de la figura, y está ocupada con ocho electrones en la esquina derecha superior. La ocupación aproximada de cada PC está indicado entre paréntesis como $(\langle \hat{N}_a \rangle, \langle \hat{N}_b \rangle)$ 26
- 2.4. Panel izquierdo: mapa de conductancia para $t_{ab} = 0,04\text{meV}$. Panel derecho: las líneas indican una degeneración de carga sobre el DPC aislado, la carga del DPC cambia por uno en cada línea e incrementa desde cero en la esquina izquierda inferior a ocho en la esquina derecha superior. Los otros parámetros son como en la figura 2.3. 27
- 2.5. Panel izquierdo: mapa de conductancia para $t_{ab} = 0,08\text{meV}$. Panel derecho: las líneas indican una degeneración de carga sobre el DPC aislado, la carga del DPC cambia por uno en cada línea e incrementa desde cero en la esquina izquierda inferior a ocho en la esquina derecha superior. La ocupación aproximada de cada PC está indicado entre paréntesis para diferentes regiones del mapa. Los otros parámetros son como en la figura 2.3. 28

2.6.	Conductancia para diferentes valores del acoplamiento túnel entre PCs $t_{ab} = 0,01, 0,015, 0,02, 0,03, 0,04, 0,05$, y $0,09$ meV. Los otros parámetros son $U_b = 0,25$ meV, $U_a = 0,7$ meV, $U_{ab} = 0,1$ meV, $\delta = 0,02$ meV, and $\Delta = 0,2$ meV. a) Ocupación total de tres electrones: $\mathcal{N}_a = 1$ y $\mathcal{N}_b = 2$. b) Ocupación total de cuatro electrones: $\mathcal{N}_a = 1$ y $\mathcal{N}_b = 3$	32
2.7.	Mapa de conductancia para $\mathcal{N}_a = 1$ y para diferentes valores de t_{ab} . Los otros parámetros son como en la figura 2.6. Observamos una asimetría par-impar en la conductancia a bajas temperaturas.	34
2.8.	Lo mismo que en la figura 2.7 pero con $\mathcal{N}_a = 0,2$	34
2.9.	Conductancia en función de la ocupación total del DPC para tres niveles en el PC b . Los puntos sólidos son resultados del NRG, y la línea es el resultado analítico de la ecuación 2.11. El voltaje de compuerta en el PC a lo escogimos tal que la ocupación promedio es uno, mientras que el voltaje de compuerta del PC b es variado para cambiar su ocupación desde cero a seis electrones. Los parámetros son $\mathcal{N}_a = 1$, $U_a/\Delta = U_b/\Delta = 7,143$, $U_{ab} = 0$, $t_{ab}/\Delta = 0,0693$, $\delta/\Delta = 0,001428$, y $\Delta = 0,07$ en unidades del semiancho de la banda de conducción de los conductores.	36
2.10.	Conductancia para diferentes valores de la ocupación en el DPC. Para una ocupación par, la conductancia es suprimida en $T < T_K^*$ debido al segundo efecto Kondo. Los parámetros son como en la figura 2.9.	37
2.11.	Conductancia (panel superior) y momento magnético efectivo al cuadrado (panel inferior) como función de la temperatura para diferentes valores del espaciamiento de energía $\delta/T_K^*(\delta = 0) = 0, 0,004, 0,4, 3,6, 7,2$ y $\delta \rightarrow \infty$ sobre el PC b . Los otros parámetros son como la Fig 2.9. Solamente para $\delta > T_K^*(\delta = 0)$ hay un cambio considerable de T_K^*	38
2.12.	Resultados de la teoría de campo medio de bosones esclavos para la ocupación del nivel y la temperatura de Kondo como una función del espaciamiento de energía δ en el PC b . Para $\delta > T_K(\delta = 0)$, llega a ser energéticamente más favorable formar las correlaciones de Kondo con el nivel de más baja energía. Esto reduce el acoplamiento de intercambio con los electrones del baño, y así también se reduce la temperatura de Kondo.	42
3.1.	Representación esquemática de un dispositivo conformado por cinco PCs en una configuración de estrella. Las energías de carga U_ℓ y los acoplamientos túnel t_ℓ para cada PC están indicadas en la figura. V_D y V_I son los acoplamientos túnel de los electrodos derecho e izquierdo al PC central, respectivamente.	45

- 3.2. Densidad espectral del PC central acoplado a dos PCs laterales ($N = 2$). Los parámetros son $U_\ell = U = 0,4$, $\varepsilon_\ell = -U/2$, $\Delta = 0,04\pi$ y $t_\ell = t = 0, 0,015, 0,02, 0,025, 0,03, 0,05, 0,07, 0,09, 0,11$, y $0,13$. Recuadro izquierdo: gráfica de $A_0(\omega)^{-1/2}$ como función del $\ln(\omega)$ para clarificar el comportamiento singular de la densidad espectral a bajas energías para $t \neq 0$. Recuadro derecho: densidad espectral a baja energía para $t_\ell = t = 0, 0,015, 0,02, 0,025$, y $0,03$ 52
- 3.3. Comportamiento de la escala de baja energía $k_B T_0$ como una función del acoplamiento antiferromagnético entre el PC central y los laterales $J = 4t^2/U$ para un sistema con dos PCs laterales. Los otros parámetros son como la figura 3.2. Las líneas representan el comportamiento de la temperatura de Kondo en los dos regímenes correlacionados. La línea entrecortada es la escala de Kondo para un modelo ferromagnético, y la línea sólida es un ajuste usando la fórmula para la segunda temperatura de Kondo (ver ecuación 3.28) con los parámetros ajustados $c_1 = 0,9$, $c_2 = 3,8$ 53
- 3.4. Momento magnético al cuadrado de un dispositivo de tres PCs como una función de la temperatura para diferentes valores del acoplamiento t entre el PC central y los laterales. Todos los parámetros son iguales a la figura 3.2, excepto para la curva $t = 0$ la cual no se muestra en esta figura. En el régimen del efecto Kondo subapantallado ($4t^2/U \ll k_B T_K^0$) se visualizan dos picos, mientras que en el régimen del efecto Kondo ferromagnético ($4t^2/U \gg k_B T_K^0$) hay un solo pico. Los valores esperados de μ^2 en cuatro casos límites (ver texto) están indicados en el eje derecho. En todo el rango de valores de t , el comportamiento a baja energía es logarítmico como mostramos en el recuadro. 54
- 3.5. Densidad espectral del PC central $A_0(\omega)$ para un dispositivo con $N = 1, 2, 3, 4$, y 5 PCs laterales. Los dispositivos están en el régimen de Kondo de dos etapas $J = 0,004D$. Los otros parámetros son $U_0 = 0,4D$, $\varepsilon_0 = -0,2D$, y $\Delta = 0,04\pi D$. Recuadro izquierdo: gráfica de $A_0(\omega)^{-1/2}$ como función de $\ln(\omega)$ para visualizar mejor el comportamiento singular de la densidad espectral a bajas energías para $N > 1$. Recuadro derecho: ampliación de la densidad espectral a baja energía. 56

3.6.	Como la figura 3.5 para dispositivos con $N = 2, 3, 4$, y 5 PCs laterales en el régimen de Kondo ferromagnético $J = 0,4D$. Recuadro izquierdo: gráfica de $A_0(\omega)^{-1/2}$ como función de $\ln(\omega)$ para visualizar mejor el comportamiento singular de la densidad espectral a bajas energías para $N > 1$. Recuadro derecho: dependencia en N de la escala de baja energía $k_B T_0$. Datos numéricos (puntos rojos rellenos) y la teoría (línea verde entrecortada).	57
3.7.	Momento magnético al cuadrado del arreglo de PCs para dispositivos con $N = 2, 3, 4$, y 5 PCs laterales. a) Régimen de Kondo en dos etapas ($J = 0,004D$). b) Régimen de Kondo ferromagnético ($J = 0,4D$). Los otros parámetros son como en la figura 3.5. Las líneas entrecortadas corresponden a un momento magnético al cuadrado para el arreglo de los PCs aislados ($V = 0$).	58
4.1.	Conductancia como función de la temperatura para diferentes valores del acoplamiento túnel t . t/D toma los valores 0,012, 0,014, 0,016, 0,018, 0,02, 0,025, 0,05 y 0,1. Los otros parámetros son $U = 0,4D$, $V = 0,2D$ y $\epsilon_\ell = -U/2$. Recuadro: figura de $G^{-1/2}$ como función de $\ln(k_B T/T_K^0)$ para una mejor observación del comportamiento singular de la conductancia a bajas energías para $t \neq 0$.	61
4.2.	Conductancia G en función de la ocupación total \mathcal{N} de los PCs. a) Conductancia para diferentes acoplamientos t . Recuadro: acoplamiento Kondo como una función de δ para $t = 0,2D$. Las flechas indican el valor de $\delta = \delta^* \simeq 0,44U$ donde J_K es cero. b) Conductancia para $t = 0,04D$ a diferentes temperaturas. $k_B T$ toma los valores desde $10^{-13}D$ a $10^{-4}D$ en pasos de 1 en el exponente. Recuadro: \mathcal{N} como función de δ para $t = 0,04D$ (línea sólida) y $t = 0,2D$ (línea entrecortada). En a) y b) graficamos la conductancia esperada a temperatura cero para un líquido de Fermi singular $G_0 \sin^2(\pi\mathcal{N}/2 - \pi/2)$ (línea gruesa roja) y un líquido de Fermi regular $G_0 \sin^2(\pi\mathcal{N}/2)$ (línea delgada negra).	62
4.3.	Coeficiente Seebeck de carga S_c en el régimen de Kondo ferromagnético ($t = 0,2D$) para $B = 0$. Hay un cambio de signo de S_c cerca de $\delta \sim U/2$ donde la ocupación total del arreglo de PCs cambia entre ~ 3 y ~ 2 . Los otros parámetros son como en la figura 4.1.	64
4.4.	Paneles de arriba a bajo: Conductancia, coeficiente Seebeck de carga, y número de Lorenz, como una función de la temperatura para un sistema en el régimen de Kondo ferromagnético $t = 0,2D$ y $\delta = 0,23U$. Los otros parámetros son como en la figura 4.1.	65

4.5.	Densidad espectral del PC central a bajas energías para $k_B T = 0,3\mu_B B = 3 \times 10^{-6}D$ en el régimen de Kondo ferromagnético ($t = 0,2D$) y $\delta = 0$. Para $B = 0$ la densidad espectral tiene simetría electrón-hueco y presenta un comportamiento singular a bajas energías. b) lo mismo como en a) pero para $\delta = 0,23U$ y $k_B T = 10^{-6}D$. Recuadro: Densidad espectral en un amplio rango de energías que incluye los picos de Hubbard en $\omega \sim \pm U/2$ y presenta la polarización de espín bajo la aplicación de un campo magnético.	65
4.6.	a) Coeficiente Seebeck de espín en el régimen de Kondo ferromagnético ($t = 0,2D$) y $g\mu_B B = 10^{-5}D$. Hay dos picos asociados con un máximo de S_{\uparrow} en $\delta = 0,23U$ y un mínimo de S_{\downarrow} en $\delta \sim U/2$. b) Corriente de polarización a temperatura cero I_p como una función de δ . Hay un rango amplio de valores de δ alrededor de $\delta \sim 0,23U$ donde la corriente es $\sim 100\%$ polarizada.	66
4.7.	Coeficiente Seebeck de espín como función de la temperatura y el campo magnético en $\delta = 0$ para a) $t = 0,02D$ y b) $t = 0,2D$. El campo magnético varía desde $10^{-11}D$ a $10^{-6}D$ en pasos de 1 en el exponente.	67
5.1.	Esquema del montaje experimental para los resultados de Kleemans et al [4]. Figura sacada de [5]. Para detalles de la composición de las múltiples capas ver el texto. Un voltaje de compuerta V_g^a hace que el nivel de la banda de conducción del PC este vacío, mientras que uno V_g^b ponga este nivel ocupado con un solo electrón.	71
5.2.	Medida experimental del espectro de fotoluminiscencia de un PC como función del voltaje de compuerta V_g , donde se muestra las diferentes excitaciones del sistema (ver texto). Figura sacada de Kleemans et al [4].	72
5.3.	a) Niveles de energía más relevantes del modelo molecular y las posibles transiciones de fotoluminiscencia (indicadas con flechas). $ \Psi_g\rangle_i$ y $ \Psi_g\rangle_f$ son los estados base inicial y final, respectivamente. $ \Psi_e\rangle_f$ es un estado final excitado. Aquí $V_{ee}^0 = \lambda(U_{ee} + U'_{ee})/e$, $V_{ee}^1 = \lambda U_{ee}/e$ y $\Delta V = \lambda(U_{eh} - U_{ee} - U'_{ee})/e$. b) Energía de todas las posibles transiciones con un ensanchamiento gaussiano artificial. El elemento de matriz de la hibridación entre el nivel del PC y el nivel efectivo del mar de Fermi es $V = 1$ meV. Los parámetros son $T = 1,75K$, $E_e^0 = -25$ meV, $E_h^0 = 1398,5$ meV, $U_{hh} = U_{eh} = U_{ee} + 2U'_{ee} = 20,97$ meV, $U'_{ee} = 3,52$ meV y $\lambda = 8$	74

5.4. Espectro de fotoluminiscencia como una función del voltaje de compuerta V_g . La intensidad está normalizada por dos veces la intensidad máxima en $V_g = -0,35V$. $\Delta = 1$ meV, y los otros parámetros son los mismos de la figura 5.3.	75
5.5. a) Línea sólida verde: ganancia de energía debido a la hibridación Δ_i del estado inicial antes de la fotoemisión. Línea entrecortada azul: ganancia de energía Δ_f para el estado final después de la fotoemisión. b) Cambio en la ganancia de energía del fotón emitido $\Delta_i - \Delta_f$ debido a la hibridación.	76
5.6. Resultados NRG de la intensidad de la fotoluminiscencia para la forma de línea cerca del comienzo de la meseta de X^0 (línea sólida verde) y en el centro de la meseta de X^0 (línea sólida naranja). Los círculos rellenos de color naranja y abiertos de color verde son los resultados digitalizados de Kleemans [4] para la forma de línea cerca al comienzo y en el centro de la meseta de X^0 , respectivamente. Las intensidades fueron divididas por dos veces el máximo de intensidad $I_0 = I(1351,6 \text{ meV})$ para $V_g = -0,35V$	77
5.7. Intensidad de la fotoluminiscencia como una función de la frecuencia $\omega' = \omega_e^* - \omega$, donde ω_e^* es la frecuencia donde la Intensidad diverge, en una escala logarítmica para dos valores del voltaje de compuerta. La intensidad está normalizada por $I_0 = I(k_B T_K / \hbar)$ calculada para $V_g = -0,144V$	79
5.8. Intensidad de la fotoluminiscencia en presencia de un campo magnético externo que produce un desdoblamiento Zeeman $\mu_B B / 2 = 0,57 \text{ meV}$ del nivel electrónico del PC y un desdoblamiento de $\sim 1,05 \text{ meV}$ para el nivel del hueco en $T = 1,75K$. La meseta donde el trión decae se desdobla en dos mesetas de intensidad similares y de diferentes anchos, mientras que en la meseta del decaimiento del excitón está dominada por una sola proyección de espín.	80
5.9. Intensidad de la fotoluminiscencia como una función de la frecuencia ω' , definida en la figura 5.7, en una escala logarítmica para diferentes valores del campo magnético. Los paneles del lado izquierdos están en el régimen del decaimiento del excitón ($V_g = -0,3V$) y los paneles del lado derecho están en el régimen del decaimiento del trión ($V_g = -0,144V$). Los otros parámetros son los mismos como en la figura 5.7. En esta figura no está incluida el factor de Boltzmann debido a los huecos, y en caso de ser incluido, la intensidad de los paneles asociados al decaimiento del espín up sería exponencialmente chica pero la dinámica electrónica sería la misma.	81

Resumen

En esta tesis se analizan las propiedades ópticas y de transporte de dispositivos de puntos cuánticos, donde las interacciones generan regímenes altamente correlacionados y fenómenos de muchos cuerpos. En esta tesis se presentan resultados obtenidos utilizando principalmente el grupo de renormalización numérica de Wilson, complementado con técnicas analíticas basadas en la teoría de líquidos de Fermi, bosones esclavos y cálculos variacionales. Con estas herramientas se exploran sistemas de arreglos de puntos cuánticos acoplados entre ellos y a conductores que proporcionan una rica variedad de fenómenos físicos tales como el efecto Kondo regular, sub-apantallado y ferromagnético. Estos podrían ser utilizados en aplicaciones que hagan uso de sus propiedades dinámicas, de transporte, termoeléctricas y termomagnéticas, gracias a la gran sensibilidad que tienen a campos eléctricos y magnéticos. Esta alta sensibilidad provee grandes valores en el poder termoeléctrico de carga y de espín, donde este último conlleva corrientes de polarización de espín, útil en aplicaciones de espintrónica. Por otro lado, analizamos resultados experimentales de fotoluminiscencia en el decaimiento de un trión y de excitones de diferentes cargas en un punto cuántico, en la que efectos de muchos cuerpos dan lugar a fenómenos como la catástrofe de ortogonalidad de Anderson, efectos de ensanchamiento en la intensidad en el espectro de fotoluminiscencia, corrimiento de las líneas de intensidad hacia el rojo o azul dependiendo del régimen de excitación.

Palabras clave: PUNTO CUÁNTICO, EFECTO KONDO

Abstract

In this thesis, we analyze the optical and transport properties of quantum dots devices, where the interaction generates highly correlated regimes and many-body phenomena. In this thesis, we use Wilson's numerical renormalization group complemented by analytical techniques based on Fermi liquid theory, slave bosons and variational calculations. With those tools, we explore systems of quantum dot arrays coupled between themselves and to conductors which provide a rich variety of physical phenomena such as the regular, underscreened and ferromagnetic Kondo effects. Those systems could be used in applications that utilize their dynamics, transport, thermoelectric, and thermomagnetic properties, owing to the great sensitivity that they have to electric and magnetic fields. This great sensitivity provides large values in the charge and spin thermopower, the latter leading to spin polarization currents, useful in spintronic applications. On the other hand, we analyze experimental results of the photoluminescence in the trion and exciton decays of different charges of a quantum dot, where many body effects lead to phenomena such as the Anderson's orthogonality catastrophe, effects of widening on the intensity of the photoluminescence spectrum, and red and blue shift of intensity lines depending on the excitation regime.

Keywords: QUANTUM DOT, KONDO EFFECT

Capítulo 1

Introducción

En esta tesis analizamos sistemas de puntos cuánticos (PCs) conectados a un gas de electrones libres donde, dependiendo de la configuración de estos, obtenemos regímenes altamente correlacionados tales como el efecto Kondo, el efecto Kondo subapantallado y el ferromagnético, e incluso procesos que presentan un enfriamiento cuántico cuando las excitaciones se relajan repentinamente emitiendo energía.

En las siguientes secciones presentaremos los sistemas y métodos así como los conceptos y definiciones necesarios para comprender los resultados de esta tesis.

1.1. Puntos cuánticos y bloqueo de Coulomb

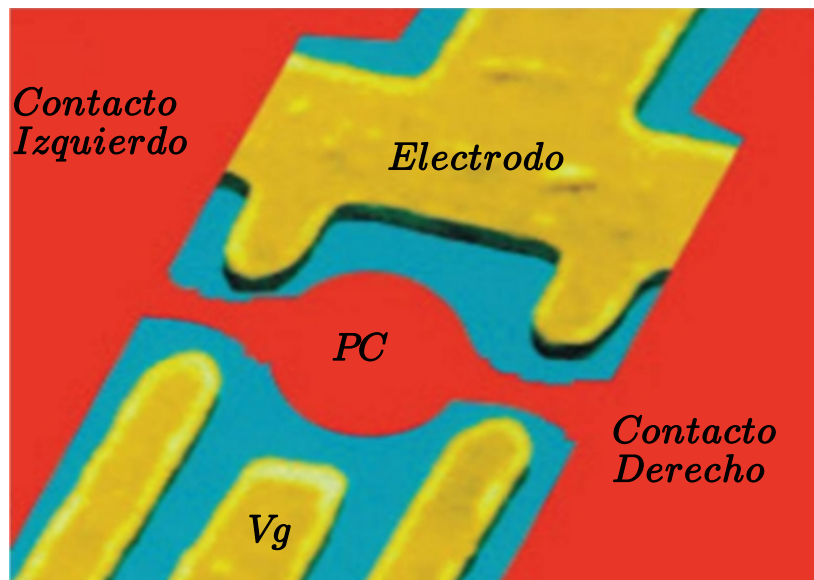


Figura 1.1: Imagen MEB de un punto cuántico definido por cinco compuertas metálicas (color amarillo) fabricadas sobre una heteroestructura de GaAs / AlGaAs en cuya interfaz reside un gas de electrones bidimensional (color rojo). El punto cuántico está en el centro de la figura, y en cada extremo vive un mar de Fermi o gas de electrones conectado eléctricamente al punto cuántico (contactos derecho e izquierdo). Figura tomada de la Ref. [1].

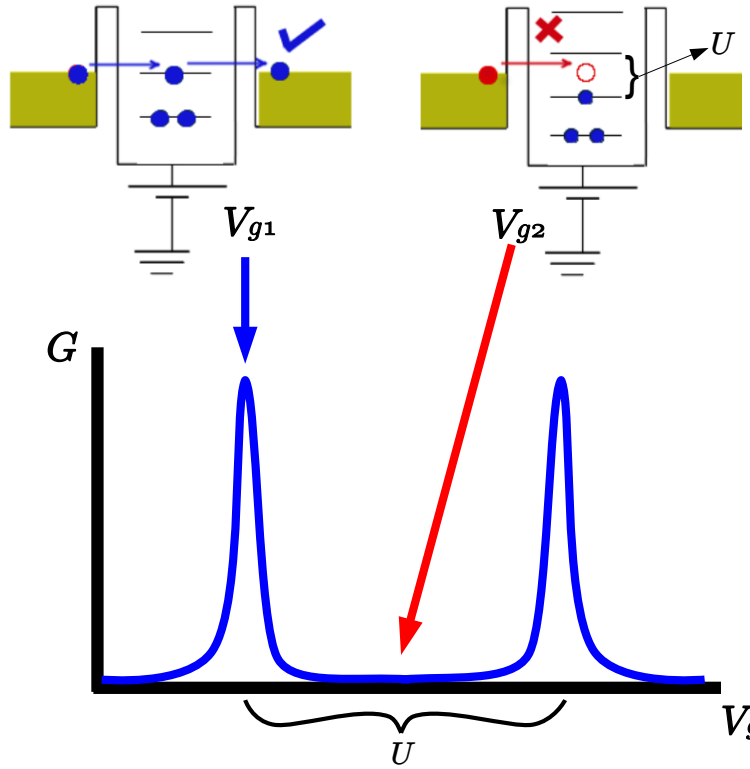


Figura 1.2: Esquema del efecto de bloqueo de Coulomb a temperaturas mayores al acoplamiento entre el PC y los contactos y menores al espaciamiento entre niveles. La conductancia G es alta para voltajes (por ejemplo V_{g1} en la figura) donde un nivel del punto cuántico coincide con el nivel de Fermi de los contactos. Para otros voltajes, la conductancia es suprimida por la falta de densidad de estados en el punto cuántico. En la figura el pico de la izquierda corresponde a un nivel con un solo electrón, y el de la derecha al doblemente ocupado el cual tiene que pagar la energía de interacción U .

Un PC es un sistema de baja dimensionalidad que confina el movimiento de los electrones en sus tres direcciones espaciales. Estos dispositivos tienen propiedades físicas muy interesantes cuando las dimensiones del mismo son comparables a la longitud de onda de los electrones. En este régimen el sistema puede ser modelado como un conjunto de electrones confinados en una caja donde la solución consiste de un espectro de energía discreto, en el cual, el espaciamiento entre niveles de energía, para un sistema no interactuante, crece con el inverso del cuadrado del tamaño característico. Cuando estas dimensiones son mucho más grandes que la longitud de onda de los electrones, el espaciamiento entre niveles es despreciable y el espectro se convierte en un continuo de energía. En un caso más realista, el confinamiento de los electrones hace que las interacciones coulombianas sean importantes, en cuyo caso el espaciamiento entre un nivel doblemente ocupado y el ocupado con un solo electrón puede ser del orden de la energía de interacción coulombiana entre dos electrones.

Debido al comportamiento discreto del espectro de energía de los PCs y su semejanza con átomos reales, éstos han sido llamados átomos artificiales [6, 7], sólo que los PCs son más “versátiles” en el sentido de que permiten variar su tamaño (y así su

espectro de energía), su carga, su acoplamiento con algún conductor, etc. Una forma de confinar electrones es aplicando campos eléctricos por medio de electrodos en una región de un gas de electrones bidimensional (GEB), como se ve en la imagen de microscopía electrónica de barrido (MEB) de la figura 1.1, donde el GEB es formado en la interfaz de una heteroestructura de GaAs y AlGaAs [8]; los electrodos que confinan los electrones están de color amarillo, y el GEB está marcado de color rojo, donde en el centro se puede observar el PC. Los electrones de los contactos izquierdo y derecho pueden entrar y salir del PC por efecto túnel. Este acoplamiento entre el PC y los contactos se puede variar por medio de los electrodos externos debajo del PC (ver figura 1.1), y además se puede variar la ocupación del PC aplicando un voltaje de compuerta (V_g) en el electrodo central. Por ejemplo: un voltaje positivo hace que la energía de los niveles del PC disminuya respecto al nivel de Fermi de los contactos, y así para ciertos voltajes, que haya transferencia de carga desde los contactos al PC (debido al equilibrio electrostático entre los contactos y el PC); y para voltajes negativos, la energía de los niveles del PC aumenta, permitiendo la transferencia de carga desde el PC a los contactos para ciertos voltajes. En estos procesos de transferencia de carga influye el tal llamado bloqueo de Coulomb [9], donde la transferencia de carga es suprimida para voltajes donde el sistema no alcanza a pagar el precio de la interacción coulombiana U para estar doblemente ocupado. En la figura 1.2 se presenta una forma esquemática para comprender este efecto a temperaturas mayores al acoplamiento entre el PC y los contactos, y menores al espaciamiento entre niveles, donde sólo para algunos voltajes (por ejemplo V_{g1} en la figura 1.2 que corresponde a un nivel con un solo electrón) los niveles discretos de energía coinciden con el nivel de Fermi de los contactos haciendo una especie de puente entre ellos. Esto permite el paso de electrones desde un contacto al otro (en presencia de un voltaje de polarización aplicado a los contactos), y así la conductancia (G) es máxima. Si aumentamos el voltaje V_g , (V_{g2} en la figura 1.2) el PC queda cargado con un electrón de más, y la conductancia va a cero, ya que en el PC no hay estados disponibles que permitan la transferencia de carga, que para el caso de la figura está bloqueada por la repulsión de Coulomb U .

En los capítulos 2, 3 y 4 trabajamos con este tipo de PCs en gases bidimensionales, mientras que en el capítulo 5 con PCs contruidos a partir de semiconductores tipo III-V de la tabla periódica. La banda de conducción de estos semiconductores en bloque está formada por orbitales tipo s , y su banda de valencia está formada por orbitales tipo p . Debido a la fuerte interacción espín órbita, el momento angular orbital y el espín no son buenos números cuánticos por separado, así que los cristales de estos semiconductores deben ser clasificados por el momento angular total L y su proyección L_z en el eje de cuantización z . Para los semiconductores tipo III-V, la banda de valencia superior tiene momento angular total $L = 3/2$, y sus proyecciones $L_z = \pm 3/2$ y $L_z = \pm 1/2$ están degeneradas en $k = 0$. Los PCs semiconductores son contruidos generalmente por la

técnica de crecimiento epitaxial de haces moleculares, por ejemplo, el crecimiento de una capa de InAs sobre un sustrato de GaAs, hace que se formen islas de InAs sobre el sustrato debido a la tensión superficial entre los dos semiconductores [10, 11]. Estas islas actúan como PCs, y la densidad de PCs sobre el sustrato y el tamaño de cada uno ellos se puede controlar variando los parámetros de crecimiento tales como el espesor de la capa de InAs y la velocidad de crecimiento [12]. Debido a la dimensión de los PCs y la tensión en su estructura, se rompe la degeneración en $k = 0$ de las proyecciones L_z , dejando una sub-banda de huecos pesados de $L_z = \pm 3/2$ y otra de huecos livianos de $L_z = \pm 1/2$ (la sub-banda $L_z = \pm 1/2$ tiene menor energía que $L_z = \pm 3/2$).

Un PC semiconductor se puede comportar de manera efectiva como una impureza magnética cuando el nivel de valencia está completamente lleno y hay un electrón en el nivel de conducción, o cuando un PC en GEB es cargado con un número impar de electrones, ya que todos los electrones estarían compensados en espín a excepción de uno. De esta forma el PC tendría un momento magnético total de espín de $1/2$, el cual, se ha utilizado en experimentos de fotoemisión [5, 13] y de transporte electrónico [14, 15] donde se visualiza la física de Kondo.

1.2. Efecto Kondo

En metales corrientes, el aporte más relevante a la resistividad a temperatura finita está dado por la interacción electrón fonón, y su dependencia en temperatura va como αT^5 , donde α es una constante, y así la resistividad decrece rápidamente bajando T hasta mantener un valor fijo en $T = 0$ debido a las impurezas y defectos del metal. Cuando estos metales son dopados con impurezas magnéticas tales como elementos de transición 3d o tierras raras 4f o PCs, aparecen contribuciones anómalas en la resistividad que dan lugar a la presencia de un mínimo a una cierta temperatura [16]. Esta anomalía fue la piedra en el zapato para los físicos durante años hasta que en 1964, Kondo dio una explicación razonable a la aparición de este mínimo [17]. Él se basó en un modelo donde se supone la existencia de un momento magnético local asociado a un espín S que está acoplado a los electrones de conducción por medio de una interacción de intercambio J ,

$$H_K = JS \cdot \mathbf{s}, \quad (1.1)$$

donde \mathbf{s} es la densidad de espín de los electrones de conducción en la posición del momento magnético. Usando teoría de perturbaciones a tercer orden en J , Kondo demostró que esta interacción conduce a una dispersión singular de los electrones de conducción cerca al nivel de Fermi y a una contribución de un $\ln T$ en la resistividad. Así la dependencia de la resistividad con la temperatura es

$$R(T) = \alpha T^5 + c_{imp} (R_0 - R_1 \ln(k_B T/D)), \quad (1.2)$$

donde R_1 es una constante, c_{imp} es la concentración de impurezas, R_0 es la resistencia debido a la dispersión por una impureza y D es el semiancho de banda de los electrones de conducción. El primer término en 1.2 es la contribución de los fonones, el primer término del paréntesis es la contribución de las impurezas, y el segundo término del paréntesis es la contribución de tercer orden de la dispersión del espín de los electrones de conducción con el momento local. La ecuación 1.2 presenta un mínimo en el caso en que la interacción sea antiferromagnética. Esta teoría, claramente no es válida cuando $T \rightarrow 0$ ya que diverge. Se pensó que al hacer perturbaciones a todo orden se podría obtener buenos resultados para temperaturas más bajas, pero se encontró que a una cierta temperatura, la teoría divergía. A esta temperatura se le llamó “temperatura de Kondo” y su expresión analítica es

$$T_K \approx D e^{-\frac{1}{\rho J}}, \quad (1.3)$$

donde ρ es la densidad local de estados de los electrones en el nivel de fermi de la banda de conducción del metal. Lo anterior sugiere que el problema requiere métodos no perturbativos para obtener soluciones a $T \geq 0$.

1.3. Modelo de Anderson y efecto Kondo en puntos cuánticos

Consideremos una impureza magnética con algún orbital d no completo y con ocupación impar, sumergida en un conductor; entonces un modelo simplificado que gobierna la dinámica del sistema está dado por el hamiltoniano de Anderson ¹ [18, 19],

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_d \hat{n}_{\sigma} + U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} + \sum_{k, \sigma} (V_k d_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + h.c.) + \sum_{k, \sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}, \quad (1.4)$$

donde d_{σ}^{\dagger} (d_{σ}) construye (destruye) un electrón en el orbital d de la impureza, $\hat{n}_{\sigma} = d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}$ es el operador número del electrón de la impureza, $c_{k\sigma}^{\dagger}$ ($c_{k\sigma}$) construye (destruye) un electrón en la banda de conducción del metal, y σ es la proyección de espín a lo largo del eje \hat{z} . El primer término de la ecuación 1.4 da la energía ε_d del electrón en el orbital d . El segundo término es la energía repulsiva U entre dos electrones en el mismo orbital. El tercer término describe el solapamiento o acoplamiento túnel V_k entre los electrones de la impureza y la banda de conducción del metal. El último término describe la banda

¹El hamiltoniano de Anderson es un modelo bastante simplificado de un solo nivel que describe cualitativamente impurezas con niveles degenerados con una ocupación total impar.

de energía de los electrones de conducción en el metal. En el régimen de parámetros donde $\varepsilon_d + U \gg \varepsilon_F$, $\varepsilon_d \ll \varepsilon_F$ con $|\varepsilon_d + U - \varepsilon_F|$, $|\varepsilon_F - \varepsilon_d| \gg \Delta$ (Δ es la hibridación y es igual a $\pi\rho V^2$, donde ρ es la densidad de estados del metal y se ha despreciado la dependencia de V_k con la energía), una teoría de perturbaciones a segundo orden en V_k , conduce el modelo de Anderson a un hamiltoniano de Kondo (ver la ecuación 1.1), más un potencial de dispersión [19]. La interacción de intercambio es antiferromagnética, y en términos de los parámetros de la ecuación 1.4 es

$$J = J_{kk'} = V_k^* V_{k'} \left(\frac{1}{U + \varepsilon_d - \varepsilon_{k'}} + \frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_d} \right). \quad (1.5)$$

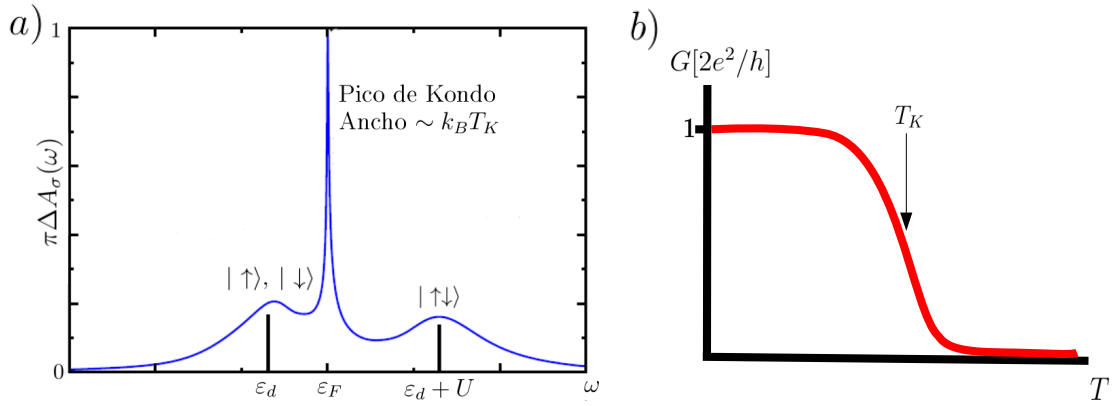


Figura 1.3: a) Densidad espectral de un punto cuántico. Se evidencian dos picos de Coulomb en ε_d y $\varepsilon_d + U$ ensanchados una cantidad Δ debido a la hibridación con el gas de Fermi, y un pico resonante de Kondo en el nivel de Fermi producido por la alta correlación entre los electrones del gas de Fermi y un electrón en el punto cuántico. b) Dependencia de la conductancia G con la temperatura T . Por debajo de una temperatura T_K la conductancia es alta en el régimen de bloqueo de Coulomb, debido al nivel resonante de Kondo.

En el régimen donde $\varepsilon_d - \varepsilon_F \gg \Delta$ el nivel d no tiene electrones, y en $\varepsilon_F - \varepsilon_d - U \gg \Delta$ el nivel está doblemente ocupado. Por otro lado cuando $|\varepsilon_d + U - \varepsilon_F|$, $|\varepsilon_F - \varepsilon_d| \ll \Delta$ el sistema se encuentra en un régimen de valencia intermedia, donde las fluctuaciones de carga son importantes. En términos de la densidad espectral (ver figura 1.3), lo anterior se refleja en un ensanchamiento del orden de Δ de los niveles $\varepsilon_d - \varepsilon_F$ y $\varepsilon_d + U - \varepsilon_F$, y un pico en el nivel de Fermi comúnmente llamado resonancia de Abrikosov-Suhl o resonancia de Kondo. Esta resonancia tiene un ancho del orden de $k_B T_K$ y se comporta como si el sistema estuviera conformado por cuasipartículas de líquido de Fermi a bajas energías [19, 20]. La autoenergía es una función cuadrática en la frecuencia a bajas energías (típico de un líquido de Fermi), y usando este resultado se puede estimar la densidad espectral [19, 20]

$$A_\sigma(\omega) \simeq A_\sigma(\varepsilon_F) - c\omega^2, \quad (1.6)$$

donde $A_\sigma(\varepsilon_F)$ toma el valor de $1/\pi\Delta$ cuando hay simetría electrón-hueco, y c es una constante. Estas cuasipartículas viven en un ancho de banda del orden del ancho de la

resonancia Kondo ($\sim k_B T_K$).

Como ya se mencionó antes, un PC se puede comportar como una impureza magnética, y su hamiltoniano, para PCs suficientemente pequeños como para considerar un solo nivel relevante, es descrito por el hamiltoniano de Anderson, ecuación 1.4. También como ya se mencionó, la conductancia en los valles de ocupación impar de bloqueo de Coulomb es cero a temperaturas mayores que T_K , pero a temperaturas menores a T_K , el efecto Kondo surge y el pico de resonante de Kondo aparece en el nivel de Fermi en la densidad espectral, dando así una máxima conductancia dentro del régimen de bloqueo de Coulomb (ver figura 1.3).

1.4. Efecto Kondo subapantallado y ferromagnético

En los capítulos 3 y 4 trabajamos con dispositivos que comprenden un arreglo de PCs acoplados entre ellos, que conectados a un conductor pueden presentar regímenes donde se presenta la física de Kondo regular (efecto Kondo convencional), el Kondo subapantallado y el ferromagnético. El efecto Kondo subapantallado (EKS) y el ferromagnético (EKF) son ejemplos de regímenes que se comportan como líquidos de Fermi singular (LFS) [21, 22], donde sus propiedades dinámicas, termodinámicas y de transporte presentan correcciones logarítmicas a baja energía.

El EKS se presenta, por ejemplo, en impurezas magnéticas de momento angular de espín mayor a $1/2$ acoplado a un solo canal de espín $1/2$ de electrones de conducción. Este canal sólo apantalla $1/2$ del espín total del sistema ², dejando un momento residual que, de forma efectiva, se acopla ferromagnéticamente al canal de conducción. Esto proporciona propiedades de LFS. Experimentalmente se puede pensar en un sistema de dos niveles con un electrón en cada nivel, donde a su vez están acoplados a un conductor [23]. Estos dos electrones tienen un acoplamiento ferromagnético (debido al intercambio de Hund) que favorece el estado de espín 1.

El EKF se presenta en todo sistema de impureza magnética de cualquier magnitud en el momento angular de espín, acoplado de forma ferromagnética a un conductor [24]. Aún no hay experimentos que presenten el EKF pero hay modelos teóricos que indican que para ciertas configuraciones topológicas de PCs se podría obtener experimentalmente el EKF [25–28]. Tanto para el espín del EKF como para el espín residual de EKS, bajo una escala de energía se desacopla del conductor de la siguiente forma [24]

$$\tilde{J}(\omega) \propto 1/\ln(\omega/T_0), \quad (1.7)$$

donde T_0 es una escala de energía [24]. La forma logarítmica de este desacople, hace que estos sistemas se comporten como LFS.

²Esto es debido a que los electrones de los conductores tiene un solo canal de espín $1/2$.

1.5. Ecuaciones de transporte en puntos cuánticos

En el capítulo 2 presentamos cálculos de la conductancia, mientras que en el 4, además de la conductancia, analizamos otras propiedades como los son el coeficiente Seebeck de carga y de espín, por el cual en esta sección se definen estos coeficientes de transporte.

Consideremos un sistema como el de la figura 1.1 donde se le aplica un pequeño voltaje de polarización $\Delta V = V_I - V_D$ y una diferencia de temperatura ΔT entre los contactos izquierdo y derecho. Entonces la corriente de carga en el régimen de respuesta lineal está dada por [29]

$$I_c = G \Delta V + G S_c \Delta T, \quad (1.8)$$

donde G es la conductancia y S_c es el coeficiente Seebeck de carga, definido como la capacidad de un sistema de convertir temperatura en voltaje cuando la corriente de carga es nula. Usando el formalismo de funciones de Green fuera del equilibrio, estas cantidades se pueden expresar como [30, 31]

$$G = \frac{e^2}{h} \mathcal{I}_0, \quad (1.9)$$

$$S_c = -\frac{k_B}{|e|} \frac{\mathcal{I}_1}{k_B T \mathcal{I}_0}, \quad (1.10)$$

con $\mathcal{I}_n = \sum_{\sigma} \mathcal{I}_n^{\sigma}$ y $\mathcal{I}_n^{\sigma} = \int_{-\infty}^{\infty} \omega^n \left(-\frac{\partial f(\omega)}{\partial \omega} \right) \mathcal{T}_{\sigma}(\omega) d\omega$ son las llamadas integrales de transporte. Aquí la cantidad $\mathcal{T}_{\sigma}(\omega)$ describe el amiento de los electrones de espín σ a través de la juntura y está dada por $\mathcal{T}_{\sigma}(\omega) = \frac{4\Delta_I \Delta_D}{\Delta_I + \Delta_D} A_{\sigma}(\omega)$ donde $A_{\sigma}(\omega)$ es la densidad espectral del PC. En la expresión de arriba $\Delta_{\alpha} = \pi \rho_{\alpha} V_{\alpha}^2$ es la hibridación entre el PC y el conductor α ($\alpha = I$ es el conductor izquierdo, y $\alpha = D$ es el conductor derecho), ρ_{α} es la densidad de estados por espín de los electrones en el nivel de Fermi y $f(\omega)$ es la función de Fermi.

En presencia de un campo magnético, se rompe la simetría de espín y se puede definir la contribución a la corriente de carga de los electrones de espín σ como

$$I_{\sigma} = G_{\sigma} \Delta V + G_{\sigma} S_{\sigma} \Delta T, \quad (1.11)$$

donde G_{σ} es la contribución del espín σ a la conductancia total, y el coeficiente Seebeck por espín es

$$S_{\sigma} = -\frac{k_B}{|e|} \frac{\mathcal{I}_1^{\sigma}}{k_B T \mathcal{I}_0^{\sigma}}. \quad (1.12)$$

Cuando $I_c = 0$, de la ecuación 1.8, aparece un voltaje en la juntura debido al gradiente de la temperatura, con coeficiente Seebeck de carga dado por $S_c = \sum_{\sigma} (G_{\sigma}/G) S_{\sigma}$. Al reemplazar este voltaje en la ecuación 1.11, y definiendo la corriente de espín como

$I_s = I_{\uparrow} - I_{\downarrow}$ se obtiene que la corriente de espín es

$$I_s = (S_{\uparrow} - S_{\downarrow}) \frac{\Delta T}{|e| \sum_{\sigma} G_{\sigma}^{-1}}. \quad (1.13)$$

Aquí podemos definir el coeficiente Seebeck de espín

$$S_s = S_{\uparrow} - S_{\downarrow}, \quad (1.14)$$

como la capacidad de convertir una diferencia de temperatura en corriente de espín.

La ley de Wiedemann–Franz dice que la razón de la conductividad térmica K_e (en términos de integrales de transporte, $K_e = (\mathcal{I}_2 - \mathcal{I}_1^2/\mathcal{I}_0)/T$) y la conductividad eléctrica de un metal, es proporcional a la temperatura. La constante de proporcionalidad es llamada el número de Lorenz, y toma el valor de $\pi^2 k_B^2/3e^2$ para sistemas que son líquidos de Fermi. Esta cantidad para $T > 0$, como veremos en el capítulo 4, difiere de este valor para un líquido de Fermi singular en ausencia de un campo magnético externo.

1.6. Excitón y trión en puntos cuánticos

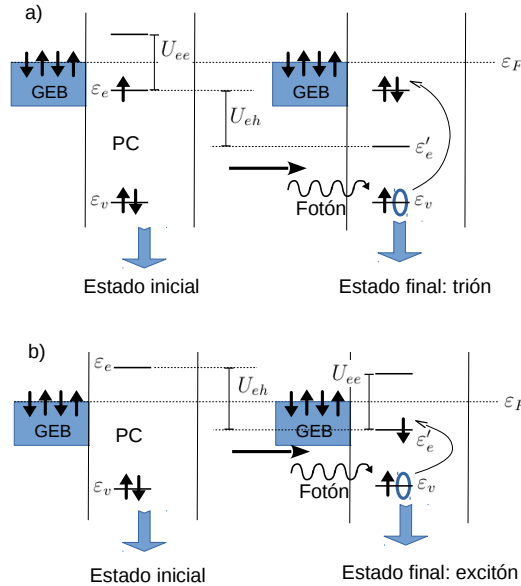


Figura 1.4: Esquema de la formación de un trión y un excitón por absorción de un fotón polarizado circularmente a la derecha de espín $L_f^z = 1$. Aquí ε_e es la energía del nivel de conducción, ε_v es la energía del nivel superior de valencia (proyección del momento angular total $\pm 3/2$), U_{ee} es el potencial repulsivo entre dos electrones en el nivel de conducción, U_{eh} es el potencial atractivo entre los electrones del nivel de conducción y un hueco en el nivel superior de valencia, y $\varepsilon'_e = \varepsilon_e - U_{eh}$. a) Formación de un trión. b) Formación de un excitón.

En PCs semiconductores se pueden presentar estados excitados como lo son el trión y el excitón además de otras excitaciones que no serán tratadas en esta tesis. Tanto

el trión como el excitón se caracterizan por tener una interacción atractiva entre los electrones de conducción y un hueco en el nivel superior de valencia; en el caso del trión hay dos electrones en el nivel de conducción, mientras que el excitón tiene sólo un electrón. De este modo el trión está cargado negativamente, y el excitón es neutro. La figura 1.4 muestra, de forma esquemática, la formación de un excitón y un de trión por medio de la absorción de un fotón externo polarizado circularmente a la derecha (proyección de espín $L_f^z = 1$), el cual traslada un electrón del nivel de valencia con espín $-3/2$ al de conducción con espín $L_e^z = -1/2$ dejando atrás un hueco pesado de espín $L_h^z = +3/2$. De esta forma $L_f^z = L_e^z + L_h^z$ se conserva la proyección de momento angular total antes y después de la absorción del fotón. Que la excitación sea un excitón o un trión depende del estado inicial del PC; por ejemplo, fijando un potencial de compuerta de tal forma que el estado inicial del PC sea como el de la figura 1.4a) (donde los niveles de valencia están completamente llenos y hay un electrón en la de conducción), la absorción de un fotón puede dar como resultado un trión en el PC, mientras que si se fija el potencial de compuerta de tal manera que el estado inicial sea como el de la figura 1.4b) (donde hay cero electrones en el nivel de conducción), la absorción de un fotón puede producir un excitón en el PC. Como se ve en la figura, la energía del nivel electrónico de conducción (ε_e) es diferente antes y después de la absorción, debido a la presencia del hueco en el estado excitado. Para el trión, si bien dos electrones en el nivel de conducción tienen que pagar la energía de repulsión coulombiana (U_{ee}) entre ellos, ésta se ve disminuida por la energía ganada de los electrones debido a la atracción coulombiana (U_{eh}) entre los electrones y el hueco. En el caso de un solo electrón en el nivel de conducción como en el excitón, sólo interviene la energía ganada por la atracción del electrón en el nivel de conducción y el hueco. En el capítulo 5 se estudiará el proceso inverso, o sea, la fotoluminiscencia producida por el PC cuando un estado excitado (sea un trión o un excitón) se recombina con el hueco del nivel de valencia. Este proceso trae consigo física muy interesante como lo es el efecto Kondo, ganancia de energía debido a la hibridación con el mar de Fermi, y la catástrofe de ortogonalidad de Anderson debido al cambio abrupto del estado del PC antes y después de la emisión de un fotón.

1.7. Catástrofe de ortogonalidad de Anderson

En 1967, Anderson probó que el estado base de un sistema de N fermiones no interactuantes es ortogonal al estado base del mismo sistema en presencia de un potencial de dispersión de rango finito, en el límite de $N \rightarrow \infty$ [32]. Esto significa que la respuesta al aplicar tal potencial involucra solamente estados excitados dentro del continuo, y que ciertos procesos en los gases de Fermi podrían ser bloqueados por la ortogonalidad a baja energía. Más tarde en 1969, Nozieres estudió la singularidad que se producía en

la intensidad en la emisión o absorción de rayos X en metales [33]. Cuando un metal absorbe un rayo X, se emite un electrón cerca del núcleo dejando un hueco profundo de carga positiva por lo que los electrones van a tratar de apantallararlo. Este cambio repentino de estado hace que el estado base inicial y final sean ortogonales produciendo la catástrofe de ortogonalidad de Anderson. La forma de línea que sigue el espectro de intensidad sigue una ley de potencias de la forma $1/\omega^\alpha$, donde ω es la frecuencia medida desde el máximo de intensidad, y α es un exponente que depende de varias fases δ_l las cuales describen la dispersión de los electrones a causa del potencial del hueco profundo. Experimentalmente en el espectro de emisión para ciertos metales como en el Al, Mg y Na tienen una discontinuidad divergente en el umbral de intensidad, para la cual se les asocia un exponente positivo, mientras que para otros metales como el Cu, la amplitud de la discontinuidad es exponencialmente pequeña por lo que se le asocia un exponente negativo. En el capítulo 5, veremos que se obtiene física como la anteriormente dicha en la fotoluminiscencia de un PC y que, además, bajo la presencia de un campo magnético externo, se pueden obtener exponentes positivos o negativos dependiendo de la proyección del espín a la largo del campo magnético.

1.8. Grupo de renormalización numérica y su implementación

Como método alternativo para solucionar el problema de Kondo de forma no perturbativa, Wilson desarrolló el grupo de renormalización numérica (NRG, siglas en inglés de “numerical renormalization group”) en 1975 [34], que le permitió ir en una cierta secuencia de pasos de grupo de renormalización desde altas energías (como el ancho de banda) hasta bajas energías (como la temperatura de Kondo). Él tomó el modelo de Kondo (Ecu. 1.1) e hizo una discretización logarítmica de la banda de conducción en intervalos $[\Lambda^{-(n+1)}D, \Lambda^{-n}D]$ y $[-\Lambda^{-n}D, -\Lambda^{-(n+1)}D]$, donde $\Lambda > 1$ es el parámetro de discretización de NRG. Después de hacer una secuencia de transformaciones, y por medio de un procedimiento de tridiagonalización estándar, mapeó el modelo discreto a una cadena semi-infinita donde el primer sitio representa el espín de la impureza (ver figura 1.5). Esta cadena se diagonaliza iterativamente, comenzando desde el sitio de la impureza y adicionando sucesivamente grados de libertad a la cadena. Con este método, el espacio de Hilbert crece de forma exponencial, el cual se debe truncar manteniendo una cierta fracción de los estados de más baja energía. Debido a la discretización, el acoplamiento entre sitios decae de forma exponencial como $t_n \propto \Lambda^{-n/2}$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) cuanto más se aleja de la impureza. Después del desarrollo de Wilson, el método de NRG ha sido generalizado y aplicado a muchos problemas de impureza cuántica como la extensión al modelo de impureza de Anderson [2], el modelo de Kondo de dos canales

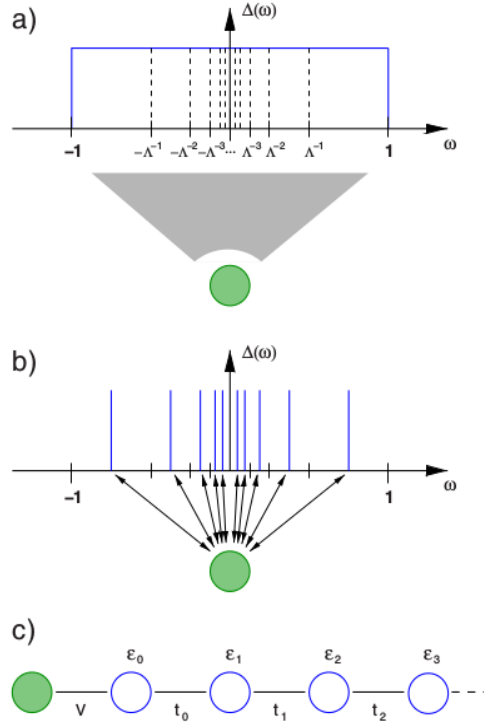


Figura 1.5: Pasos iniciales del método NRG para una impureza de Anderson (círculo lleno) acoplada a una banda de conducción continua por medio de la función de hibridación $\Delta(\omega)$. a) se introduce una discretización logarítmica en la banda de conducción a través del parámetro de discretización Λ . b) El espectro continuo para cada intervalo, es aproximado con un solo nivel. c) Se mapea el espectro discreto en una cadena semi-infinita con la impureza acoplada con el primer sitio por medio del acoplamiento túnel V . Los parámetros de energía de sitio ϵ_n y el acoplamiento entre sitios vecinos t_n son calculados en el mapeo usando un método de tridiagonalización. La figura fue tomada de la referencia [1].

[35] y otros (ver introducción de la referencia [1]).

Para un modelo de Anderson con el acoplamiento túnel entre la impureza y el metal independiente de la energía $V_k = V$ y $D = 1$, el hamiltoniano después del mapeo a una cadena es

$$H = H_{imp} + V \sum_{\sigma} (d_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}) + \sum_{\sigma, n=0}^{\infty} [\epsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} + t_n (c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+1\sigma} + c_{n+1\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma})], \quad (1.15)$$

donde H_{imp} contiene la energía del nivel electrónico de la impureza, y la repulsión de Coulomb entre dos electrones en este nivel. $c_{n\sigma}^{\dagger}$ ($c_{n\sigma}$) crea (destruye) un electrón sobre el sitio n . Los parámetros de la cadena son la energía de sitio ϵ_n y el acoplamiento entre sitios t_n . Este hamiltoniano se puede ver como una serie de hamiltonianos H_N ($N = 0, 1, 2, \dots$) los cuales se aproximan a H cuando $N \rightarrow \infty$ de la siguiente forma:

$$H = \lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda^{-(N-1)/2} H_N, \quad (1.16)$$

con

$$\begin{aligned}
H_N = & \Lambda^{(N-1)/2} [H_{imp} + V \sum_{\sigma} (d_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}) + \sum_{\sigma n=0}^N \varepsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} \\
& + \sum_{\sigma n=0}^{N-1} t_n (c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+1\sigma} + c_{n+1\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma})]. \quad (1.17)
\end{aligned}$$

Aquí el factor de $\Lambda^{(N-1)/2}$ ha sido escogido de tal manera que cancele la dependencia en N de t_{N-1} , así se evitan errores de precisión numérica en la implementación en algún código computacional, ya que t_n tal como está, obtiene valores exponencialmente pequeños con el incremento de n . La ecuación 1.17 se puede expresar en términos de dos hamiltonianos sucesivos como sigue

$$H_{N+1} = \sqrt{\Lambda} H_N + \Lambda^{N/2} \sum_{\sigma} [\varepsilon_{N+1} c_{N+1\sigma}^{\dagger} c_{N+1\sigma} + t_N (c_{N\sigma}^{\dagger} c_{N+1\sigma} + c_{N+1\sigma}^{\dagger} c_{N\sigma})], \quad (1.18)$$

con

$$H_0 = \Lambda^{-1/2} [H_{imp} + \sum_{\sigma} \varepsilon_0 c_{0\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + V (d_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} d_{\sigma})]. \quad (1.19)$$

La relación de recurrencia de la ecuación 1.18 se puede entender en términos de una transformación de grupo de renormalización R tal que

$$H_{N+1} = R(H_N), \quad (1.20)$$

donde se obtiene un nuevo hamiltoniano H_{N+1} a partir de otro H_N . En este proceso iterativo, las autoenergías de H_N se renormalizan. Cuando se diagonaliza el hamiltoniano de la ecuación 1.18 para una longitud N de la cadena, la separación de los niveles más bajos de energía son del orden de 1 debido al reescalo $\Lambda^{(N-1)/2}$. Entonces para alguna temperatura T , los estados asociados a los autovalores $E_l^{(N)} - E_0^{(N)} \gg \Lambda^{(N-1)/2} k_B T$ ($E_0^{(N)}$ es la energía del estado base) no van a contribuir significativamente al cálculo de las propiedades termodinámicas, ya que son exponencialmente suprimidos por el factor de Boltzman. De lo anterior se puede definir una escala de energía para el hamiltoniano H_N como la temperatura crítica $k_B T_N \sim \Lambda^{-(N-1)/2}$ para una cadena de longitud N , en la cual se separan los autoestados con energías relevantes para el cálculo de propiedades termodinámicas de los que no. Con esto también se puede formar un criterio para desechar estados en la diagonalización de H_N , que consiste en eliminar todos aquellos estados que tienen energías mucho mayores a la escala de energía. De esta forma se trunca el espacio de Hilbert y se evita su crecimiento exponencial.

Un punto fijo ocurre cuando las autoenergías no cambian (o no se renormalizan) a medida que se va aumentando la longitud de la cadena. Para el caso del modelo de Kondo existen dos puntos fijos, uno para cuando N es chico donde $J \rightarrow 0$ (punto

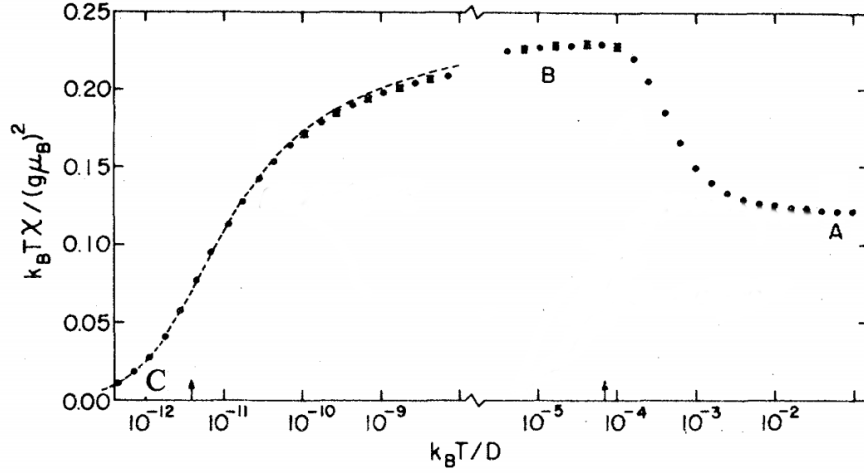


Figura 1.6: Susceptibilidad magnética o momento magnético al cuadrado en función de la temperatura para el modelo de Anderson. Se presentan tres zonas, la zona *A* que evidencia el punto fijo de OL, la zona *B* evidencia el punto fijo de ML y la zona *C* evidencia el punto fijo de AF. La línea entrecortada es una curva de susceptibilidad universal, y la flecha marca la temperatura de Kondo. Esta figura fue sacada de la referencia [2].

fijo de orbital libre, OL) y otro para cuando N es grande donde $J \rightarrow \infty$ (punto fijo de acoplamiento fuerte, AF). El punto fijo AF evidencia el límite de Kondo donde la impureza tiene un acoplamiento fuerte con el primer sitio de la cadena formando un estado singlete fuerte (en este caso entiéndase el estado singlete como un estado altamente correlacionado de espín total igual a cero), y se desacopla del resto de los sitios de la cadena, y en términos físicos, los electrones de la banda de conducción de espín 1/2 apantallan el espín de la impureza formando este estado singlete altamente correlacionado. Para el modelo de Anderson, existen tres puntos fijos: uno para cuando N es chico donde $V \rightarrow 0$ (punto fijo OL), otro para N intermedios donde se forma el punto fijo de momento magnético local, ML, y el último para cuando N es grande donde $V \rightarrow \infty$ (punto fijo AF). Estos puntos fijos se visualizan mejor en un cálculo de la susceptibilidad magnética multiplicada por la temperatura. La susceptibilidad magnética χ se puede calcular incluyendo un término de acoplamiento de la forma

$$H_B = \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (1.21)$$

entre el momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ de la impureza y un campo magnético externo \mathbf{B} . Para un espín total S libre, la dependencia en temperatura de la susceptibilidad magnética sigue una ley de Curie:

$$\chi = \frac{C}{T}, \quad (1.22)$$

donde $C = (g_e \mu_B)^2 S(S+1)/3$ es la constante de Curie. En el caso general, el espín de la impureza no es libre, y varios multipletes pueden ser relevantes a una temperatura dada. No obstante, es útil definir un momento magnético al cuadrado que depende de

la temperatura como $\mu^2(T) = \chi T$ para analizar los procesos de los puntos fijos.

En la figura 1.6 se muestra el momento magnético al cuadrado μ^2 de la impureza. En la zona *A* se está en un régimen de OL ($k_B T > U$) donde hay dos estados (estado de una partícula con proyección de espín $+1/2$ o $-1/2$, que comunmente son llamados partículas con espín up y down, respectivamente) que contribuyen a μ^2 , en unidades de $(g_e \mu_B)^2$, con $(1/2)^2$ cada uno, y dos que no aportan (vacío y doblemente ocupado), así, al hacer el promedio sobre los cuatro estados nos da que $\mu^2 = 1/8$. En la zona *B* se está en el régimen de ML donde solamente el estado degenerado de una partícula participa en el cálculo de μ^2 ³. Cada uno contribuye con $(1/2)^2$ y al hacer el promedio sobre los dos estados queda que $\mu^2 = 1/4$. Finalmente, la zona *C* entra en el régimen de AF (en $T < T_K$ donde T_K está marcada por la flecha en la figura) donde el momento local del punto fijo anterior es apantallado por los electrones de conducción del metal, y así se forma un estado singlete de momento angular cero que no contribuye a μ^2 . Aquí, μ^2 tiende a cero suavemente para $T < T_K$.

En un código computacional, para diagonalizar el hamiltoniano de forma iterativa, primero se diagonaliza H_0 . Después, para diagonalizar H_1 , se toma la base de H_0 y se le adiciona los grados de libertad del sitio 1, los cuales son 4: cero electrones, un electrón de espín up, un electrón de espín down, y el doblemente ocupado. De la ecuación 1.18 para H_1 , el primer término incluye simplemente los autovalores de la iteración anterior (de H_0) multiplicados por $\Lambda^{-1/2}$, el segundo término sólo le adiciona la energía del sitio 1 (calculada por el método de tridiagonalización), y los últimos dos términos mezclan los dos últimos sitios. Después se repite el mismo procedimiento para un nuevo sitio adicionado, y así sucesivamente hasta llegar a algún punto fijo deseado. Cabe mencionar que para cierta iteración $n = m_0$ se debe empezar a truncar el espacio de Hilbert para evitar saturar la memoria del computador. Los autoestados del Hamiltoniano en la iteración $n + 1$ están relacionados con la base de la iteración n mediante la siguiente transformación unitaria U :

$$|w, n + 1\rangle = U_{n+1}(w, r, s)|r, s, n + 1\rangle \quad (1.23)$$

donde $|r, s, n + 1\rangle = |r, n\rangle \otimes |s, n + 1\rangle$ con $|r, n\rangle$ autoestados de la iteración n y $|s, n + 1\rangle$ es la base para el sitio adicionado $n + 1$.

El principal método de cálculo numérico para diferentes propiedades de PCs que aplicamos en esta tesis es el NRG, acompañado de mejoras que se han desarrollado en el transcurso de los años. Dentro de las mejoras que existen está el “z-trick” [36, 37] donde el intervalo de la discretización logarítmica de la banda de conducción es multiplicada

³Los estados vacío y doblemente ocupado no contribuyen en la dinámica a más baja energía ya que tienen energías mayores a $k_B T$, y están suprimidos por el factor de Boltzmann. No obstante estos estados pueden tener una pequeña ocupación debido a las fluctuaciones cuánticas.

por el factor Λ^{-z} . Esto permite barrer más estados de la banda de conducción al hacer varias corridas NRG para diferentes z , y al final de todo, las propiedades que se quieren calcular son la contribución al promedio de cada z . El resultado con esto es poder aumentar el valor de Λ (ya que habría menos error por discretizar la banda), y la ventaja es que el sistema converge más rápido a los puntos fijos, ya que la escala de energía disminuye más rápido, y también permite disminuir el número de estados mantenidos en cada iteración. Otra mejora es el uso de una base NRG completa [38] usando los estados eliminados en cada iteración, y con éstos poder formar una matriz densidad completa [39], útil en el cálculo de propiedades de impurezas magnéticas a toda temperatura, como la susceptibilidad magnética y el calor específico [40], y la densidad espectral [39]. Ésta última mejora al NRG generalmente es referida en la literatura, con las siglas en inglés FDM-NRG (Full Density Matrix Numerical Renormalization Group).

Nosotros reproducimos el código computacional de NRG de Wilson, bajo el lenguaje de programación del C++, donde hicimos uso de las librerías estándar del C++ (ISO C++, siglas del inglés “International Standardization Organization”) y especialmente la librería “Armadillo” que es una librería de álgebra lineal de alta calidad, que alcanza un buen equilibrio entre velocidad y facilidad de uso. Utilizamos dos tipos de simetrías para poder dividir el espacio de Hilbert en subespacios, y diagonalizarlos de forma independiente. Cada subespacio comprende la simetría de proyección de espín (S_z) y el número de partículas (Q). El código está basado en una programación orientada a objetos, y está dividido en tres programas esencialmente, donde uno es el programa principal que recibe los parámetros externos e inicializa todas las variables que necesita el NRG, como por ejemplo los parámetros de la impureza o impurezas, y los coeficientes de la cadena de Wilson. Una vez hecho esto creamos un objeto el cual contiene información de la diagonalización n -ésima y el cálculo de todas las propiedades que se desean para esta iteración, como lo son las propiedades termodinámicas, dinámicas y de transporte. En éste, el espacio de Hilbert de H_0 (ver ecuación 1.19) lo dividimos en subespacios, y agrupamos los estados con los mismos números cuánticos Q y S_z en otro objeto, el cual contiene toda la información necesaria de un subespacio específico como la matriz a diagonalizar, sus autoestados y sus autoenergías. A una determinada iteración m_0 empezamos a truncar el espacio de Hilbert por la eliminación de los estados de más alta energía.

La implementación de la obtención de una base completa NRG es como sigue: la base completa NRG está conformada por todos los estados eliminados de las iteraciones anteriores y por todos los estados de la última iteración ⁴ teniendo en cuenta que para el cálculo de cualquier propiedad del sistema se deben tener en cuenta todos los grados de libertad de los sitios de la cadena de Wilson que no se tuvieron en cuenta en la

⁴Ver [38] para una demostración que estos estados efectivamente conforman una base completa NRG.

iteración n -ésima. Todos estos estados deben ser guardados en una nueva clase.

El aporte de la impureza a la susceptibilidad magnética, la calculamos con la formula $\chi_{imp} = \chi - \chi_0$, donde $\chi = \frac{(g_e \mu_B)^2}{T} (\langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2)$ es la susceptibilidad de la impureza más la banda del conductor, y χ_0 es la susceptibilidad sólo de la banda del conductor. Con la base completa calculamos estos promedios con el factor de Boltzmann correspondiente. Las propiedades dinámicas como la densidad espectral de estados de la impureza, son más complicadas de calcular. La densidad espectral en el sitio de la impureza está dada en la representación de Lehmann como:

$$A_\sigma(\omega) = \sum_{ab} \frac{e^{-\beta E_a}}{Z} |\langle b | d_\sigma | a \rangle|^2 \delta(\omega - E_{ba}), \quad (1.24)$$

donde $\beta = 1/k_B T$, $|i\rangle$ son autoestados con autoenergías E_i de un cierto hamiltoniano ($i = a, b$, y en el caso de los resultados de fotoluminiscencia del capítulo 5 los hamiltonianos son diferentes para a y para b), $Z = \sum_a e^{-\beta E_a}$ es la función de partición, y $E_{ba} = E_b - E_a$. Esta función espectral se puede dividir en tres funciones espectrales para una determinada iteración m' como sigue:

$$A_1^{m'} = \frac{1}{Z_{m'}} \sum_{ll'} |d_{ll'}^{m'}|^2 (e^{-\beta E_l^{m'}} + e^{-\beta E_{l'}^{m'}}) \delta(\omega - E_{l'l}^{m'}), \quad (1.25)$$

$$A_2^{m'} = \frac{1}{Z_{m'}} \sum_{lk} |d_{lk}^{m'}|^2 e^{-\beta E_l^{m'}} \delta(\omega - E_{kl}^{m'}) + \frac{1}{Z_{m'}} \sum_{kl} |d_{kl}^{m'}|^2 e^{-\beta E_k^{m'}} \delta(\omega - E_{lk}^{m'}), \quad (1.26)$$

$$A_3^{m'} = \sum_{m=m_0+1}^{m'-1} \sum_{lkk'} \left[d_{lk}^m \rho_{red}^{m' \rightarrow m}(k, k') d_{k'l}^{\dagger m} \delta(\omega - E_{kl}^m) + d_{kl}^m \rho_{red}^{m' \rightarrow m}(k', k) d_{lk'}^{\dagger m} \delta(\omega - E_{lk}^m) \right], \quad (1.27)$$

donde los subíndices l y k denotan estados eliminados y mantenidos respectivamente, $d_{ij}^m = \langle i, m | d | j, m \rangle$ con $|i, m\rangle$ un autoestado de la iteración m , $Z_m = \sum_i e^{-\beta E_i^m}$ es la función de partición de los autoestados de la iteración m , y $\rho_{red}^{m' \rightarrow m}(k, k') = Tr_e [\langle k, e, m | \tilde{\rho}_{m'} | k', e, m \rangle]$ es la matriz densidad reducida, siendo e los grados de libertad de los sitios de la cadena de Wilson que no se tuvieron en cuenta en la iteración m , y $\tilde{\rho}_{m'} = |l, m'\rangle e^{-\beta E_l^{m'}} / Z_m \langle l, m' |$ es la matriz densidad de los autoestados de la iteración m . El elemento de matriz d_{ij}^m se puede calcular recursivamente utilizando la transformación unitaria de la ecuación 1.23 produciendo:

$$d_{ij}^m = \sum_{p,s} \sum_{p',s'} U_m(i, p, s) U_m(j, p', s') \delta_{s,s'} d_{pp'}^{m-1}. \quad (1.28)$$

Primero se calcula d_{ij}^0 para la iteración 0 de tal forma que con el conocimiento de los autoestados de la iteración 1 se pueda calcular d_{ij}^1 de la ecuación 1.28, y así recursivamente para cualquier iteración m . $\rho_{red}^{m' \rightarrow m}(k, k')$ también se puede calcular recursivamente ha-

ciendo la transformación unitaria de 1.23.

Finalmente el resultado numérico que se obtiene al calcular la densidad espectral, son polos discretos con un determinado peso, que deben ser suavizados con la combinación de una función gaussiana normal (para polos menores, en valor absoluto, que la temperatura considerada) y una gaussiana logarítmica (para polos mayores, en valor absoluto, que la temperatura considerada), como lo hacen en la referencia [38].

1.9. Organización de la tesis

En el capítulo 2 analizamos las propiedades de transporte de un dispositivo de dos PCs acoplados, donde uno de ellos está conectado a dos conductores, y es lo suficientemente chico como para considerar que tiene un solo nivel relevante. El otro PC está acoplado por efecto túnel al PC chico, y tiene un tamaño más grande, el cual lleva a considerar su estructura multinivel. Al hacer un análisis de líquido de Fermi mostramos que la conductancia a baja energía del dispositivo está determinada por la ocupación electrónica total del doble PC. Cuando el PC pequeño está en el régimen de Kondo, y el PC grande tiene un número de electrones par, la conductancia del sistema es máxima, mientras que cuando hay una ocupación impar en el PC grande, hay dos efectos Kondo a diferentes temperaturas, siendo la conductancia cero a bajas temperaturas. La temperatura de Kondo del segundo efecto Kondo se ve afectada por la estructura multinivel del PC grande. Cuando aumentamos el espaciamiento de los niveles del PC grande, visualizamos un cruce entre un régimen de temperatura de Kondo grande a una pequeña cuando el espaciamiento entre niveles es del orden de la temperatura de Kondo grande. En el capítulo 3 analizamos las propiedades a baja energía de un dispositivo con $N + 1$ PCs en una configuración estrella. Aquí uno de los PCs (central) está acoplado a dos conductores, y a su vez, a N PCs. Extendimos resultados previos para el caso de $N = 2$, mostrando que, en el régimen de parámetros adecuados, el hamiltoniano a baja energía del sistema es un modelo de Kondo ferromagnético para una impureza de espín $L = (N - 1)/2$. Cuando el acoplamiento entre los PCs es pequeño, se presentan dos efectos Kondo a medida que se disminuye la temperatura. El primer efecto Kondo es regular y el segundo es un efecto Kondo subapantallado de un espín $S = N/2$. Los cálculos numéricos para las propiedades espectrales y termodinámicas del sistema, presentan un comportamiento singular a bajas temperaturas, y nos permiten caracterizar los diferentes regímenes altamente correlacionados. En el capítulo 4 analizamos las propiedades lineales de transporte termoeléctricos del dispositivo del capítulo 3 para $N = 2$. Para un amplio rango de parámetros y en la ausencia de un campo magnético el estado base del sistema es un líquido de Fermi singular que conduce a un comportamiento no analítico en las propiedades de transporte a bajas energías. El comportamiento singular está asociado con el efecto Kondo ferromagnético

o subapantallado, dependiendo de los parámetros. Cuando aplicamos un campo magnético, el estado base del sistema es un líquido de Fermi regular y observamos un gran pico en el poder termoeléctrico de espín como función de la temperatura, y una gran polarización en la corriente de espín ($\sim 100\%$) para un amplio rango de parámetros debido a efectos de interferencia. Finalmente, en el capítulo 5 calculamos el espectro de fotoluminiscencia de un solo PC semiconductor acoplado a un reservorio de electrones y los comparamos con los experimentos. Un voltaje de compuerta permite sintonizar al PC entre regímenes dominados por la recombinación de un trión o un excitón. El decaimiento del trión lo podemos considerar como un enfriamiento cuántico en el cual las correlaciones entre el espín del PC y los electrones de conducción en el reservorio son introducidos repentinamente, dando como resultado un comportamiento de Kondo o de valencia intermedia. Para el decaimiento del excitón, el comportamiento altamente correlacionado de Kondo toma lugar en el estado inicial. Al aplicar un campo magnético externo, las líneas espectrales se dividen en dos picos de diferente amplitud. Explicamos las características principales de lo que se observa experimentalmente en el espectro y su dependencia con el voltaje de compuerta.

Capítulo 2

Transporte a través de dos puntos cuánticos acoplados lateralmente

2.1. Introducción

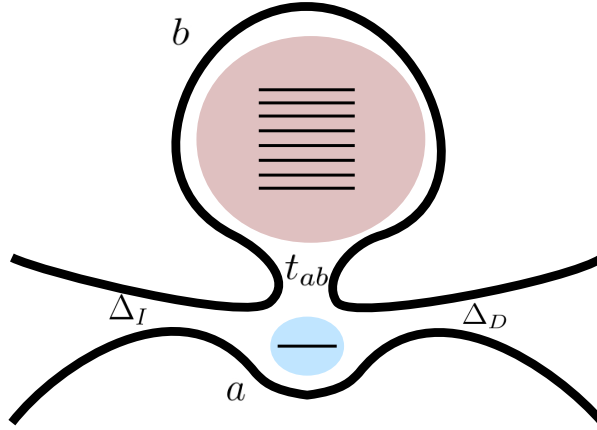


Figura 2.1: Representación esquemática del dispositivo de doble puntos cuánticos acoplados lateralmente. El PC a está acoplado a los electrodos metálicos izquierdo (I) y derecho (D). Los orbitales del PC b están acoplados al PC a a través de una barrera túnel.

En este capítulo consideramos un sistema de doble punto cuántico (DPC) acoplados lateralmente tal como se muestra en la figura 2.1, donde sólo uno de los PCs (PC pequeño o central) está acoplado a los electrodos, y el otro PC (PC grande o lateral) está acoplado lateralmente al PC central. Las propiedades de estos dispositivos se pueden obtener a través de medidas de transporte usando los electrodos metálicos. El acoplamiento entre PCs puede competir con el efecto Kondo conduciendo a una rica variedad de regímenes correlacionados, como por ejemplo, en el caso en que el PC lateral tiene un solo nivel electrónico de energía relevante, puede presentar dos efectos Kondo a diferentes escalas de energía [41, 42], o cuando el PC lateral es muy grande teniendo un continuo de energía, se presenta un efecto Kondo de dos canales

[43]. También se puede obtener el problema de la caja de Kondo cuando el PC lateral tiene un tamaño intermedio [44–54]. Las propiedades de este tipo de dispositivos han

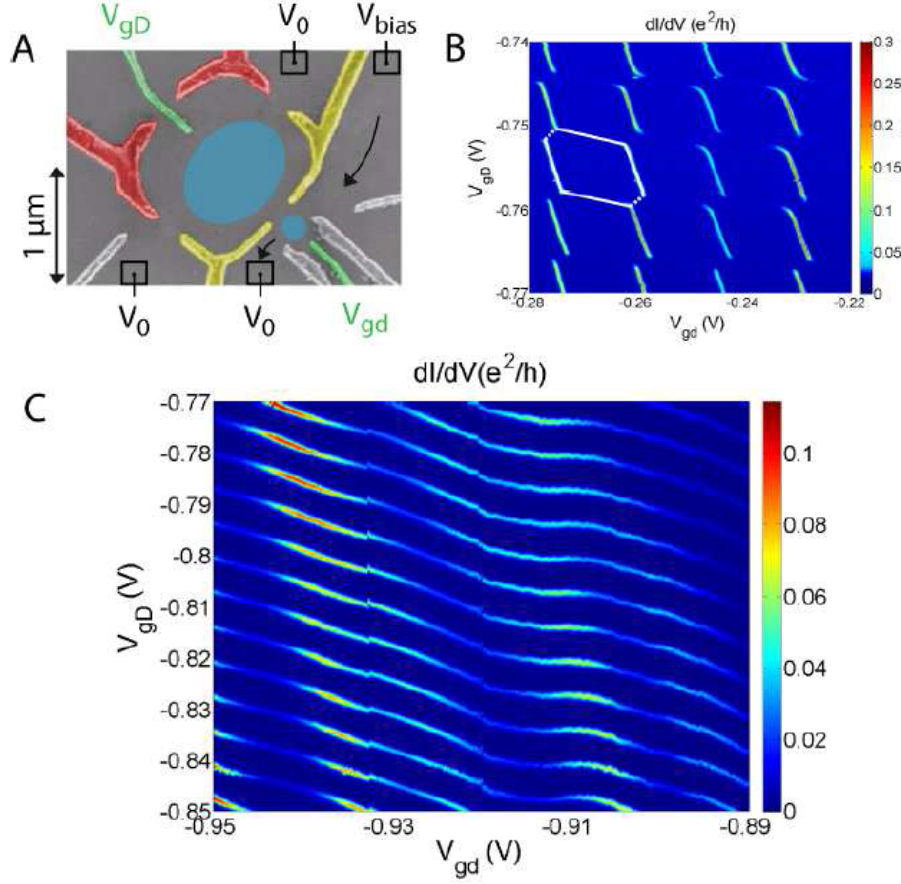


Figura 2.2: A) Imagen MEB del dispositivo. Los PCs están marcados con un color celeste. El acoplamiento túnel entre PCs se controla por medio de las compuertas amarillas. Todos los contactos ohmicos están al mismo potencial (V_0) a excepción del conductor superior del PC pequeño donde se aplica un voltaje de polarización V_{bias} . Las energías y las ocupaciones de cada PC se cambian a través de las compuertas verdes al aplicarles un voltaje de compuerta V_{gd} para el PC pequeño y V_{gD} para el PC grande. B) Diagrama de estabilidad cuando el acoplamiento entre PCs es débil (temperatura a 30mK). Se dibuja la conductancia diferencial con respecto a los voltajes de compuerta V_{gd} y V_{gD} . C) Diagrama de estabilidad cuando el acoplamiento entre PCs es fuerte. A temperaturas tan bajas, se encuentra un patrón de conductancia compleja. Figura sacada de los experimentos de Baines et al [3].

sido tratadas con estudios teóricos y experimentales. Sin embargo, la mayoría de estos estudios teóricos se han enfocado sobre modelos simplificados, como considerar un solo nivel interactuante en cada PC [29, 41, 55–58], o un continuo de niveles del PC lateral [59, 60], o despreciar interacciones en el PC lateral [61].

Recientes resultados experimentales para un dispositivo de DPC lateralmente acoplados (ver la figura 2.2 A) para ver el montaje experimental) muestra un cambio en la estructura de niveles de los DPC como una función del acoplamiento entre PCs [3]. En un régimen espectroscópico, donde la hibridación entre el PC central y los conductores es más pequeño que la energía térmica, los diamantes de bloqueo de Coulomb cambian su estructura como una función del acoplamiento entre PCs señalando un cambio en la

estructura electrónica fundamental asociada a la naturaleza multinivel de los PCs [ver figura 2.2 B) y C)].

En este capítulo analizamos las propiedades de transporte de un dispositivo de DPC acoplados lateralmente, y consideramos múltiples niveles en el PC lateral e interacciones coulombianas dentro de cada PC y entre PCs. Obtenemos una relación exacta entre la conductancia a temperatura cero y la carga en el DPC (suponiendo que los acoplamientos son independientes de la energía) la cual generaliza las reglas de suma de Friedel para el dispositivo de DPC. También analizamos diferentes regímenes de electrones fuertemente correlacionados que ocurren a temperatura finita usando NRG y caracterizamos el transporte electrónico a través del dispositivo.

En el régimen de acoplamiento débil (para temperaturas más altas que la escala de energía asociada al acoplamiento a los conductores) usamos una aproximación perturbativa, comenzando desde autoestados exactos para el sistema del DPC aislado de los conductores. En el régimen de acoplamiento fuerte, usamos la aproximación de campo medio de bosones esclavos para poder interpretar los resultados de NRG. También presentamos la asimetría usual par-impar en los valles de bloqueo de coulomb (debido al efecto Kondo), los cuales pueden ser completamente alterados según el régimen de acoplamiento entre PCs.

El efecto de incrementar el acoplamiento entre PCs sobre la conductancia es muy diferente para diferentes ocupaciones en el DPC. En el régimen de acoplamiento fuerte entre PCs, se presenta una competencia entre el espaciamiento entre niveles en el PC lateral y un acoplamiento Kondo efectivo entre los PCs, conduciendo a un cambio de comportamiento a una pequeña escala de energía relacionada con un segundo efecto Kondo.

Este capítulo está organizado como sigue: en la sección 2.2 describimos el modelo, en la sección 2.3 presentamos la conductancia y la ocupación en el DPC en el régimen de acoplamiento débil entre los electrodos y el DPC para parámetros experimentales de la Ref. [3]. En la sección 2.4 presentamos resultados exactos para la conductancia a temperatura cero. En la sección 2.5 presentamos resultados numéricos para la conductancia en el régimen de Kondo. En la sección 2.6 calculamos la conductancia y la susceptibilidad magnética para un modelo con dos y tres niveles cuasidegenerados en el PC lateral. También analizamos un modelo efectivo en la aproximación de campo medio de bosones esclavos.

Los siguientes resultados los publicamos en [62].

2.2. Modelo

El dispositivo de DPC está descrito por el siguiente hamiltoniano

$$H = H_C + H_t + H_e + H_V + H_{el} . \quad (2.1)$$

Aquí H_C describe la interacción electrostática en la aproximación de interacción constante[63]

$$H_C = \sum_{\ell=a,b} \frac{U_\ell}{2} (\hat{N}_\ell - \mathcal{N}_\ell)^2 + U_{ab} (\hat{N}_b - \mathcal{N}_b) (\hat{N}_a - \mathcal{N}_a) \quad (2.2)$$

donde $\hat{N}_a = \sum_\sigma a_\sigma^\dagger a_\sigma$ es la ocupación del PC central (PC a), $\hat{N}_b = \sum_{\sigma,\alpha} b_{\alpha\sigma}^\dagger b_{\alpha\sigma}$ es la ocupación del PC lateral (PC b), $d_{\alpha\sigma}^\dagger$ ($d_{\alpha\sigma}$) es el operador de creación (destrucción) de un electrón dentro del PC d en el nivel α (este subíndice no está para $d = a$, ya que sólo consideramos un solo nivel) con proyección de espín σ , $\mathcal{N}_\ell = C_{g\ell} V_{g\ell} / U_\ell$ es un parámetro que depende del voltage de compuerta $V_{g\ell}$ cuya función es mover los niveles electrónicos del PC ℓ , $C_{g\ell}$ es la capacitancia del PC ℓ con su correspondiente electrodo de compuerta, U_ℓ es la energía de carga y U_{ab} está dado por la capacitancia mutua de los PCs[64–67].

$$H_t = \sum_{\sigma,\alpha} t_{ab}^\alpha (a_\sigma^\dagger b_{\alpha\sigma} + h.c.) , \quad (2.3)$$

describe el acoplamiento túnel entre los diferentes orbitales del PC b y un solo nivel relevante del PC a . Para describir la separación de los niveles de energía sobre el PC b , incluimos el término de energía de un solo electrón:

$$H_e = \sum_{\sigma,\alpha} \tilde{\varepsilon}_{b\alpha} b_{\alpha\sigma}^\dagger b_{\alpha\sigma} . \quad (2.4)$$

Finalmente,

$$H_V = \sum_{\nu=I,D} \sum_{k,\sigma} V_{k\nu} \left[c_{\nu k\sigma}^\dagger a_\sigma + h.c. \right] , \quad (2.5)$$

describe el acoplamiento entre el PC a y el electrodo izquierdo (I) y derecho (D), los cuales son modelados por dos gases de Fermi:

$$H_{el} = \sum_{\nu,k,\sigma} \varepsilon_k c_{\nu k\sigma}^\dagger c_{\nu k\sigma} . \quad (2.6)$$

La conductancia a través del sistema está dada por la ecuación 1.9, y en el límite de temperatura cero, $-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \rightarrow \delta(\varepsilon)$, y la conductancia es proporcional a la densidad espectral en el nivel de Fermi $\sum_\sigma A_{a\sigma}(\varepsilon_F)$ sobre el PC a . Como presentaremos en la sección 2.4, suponiendo un estado base de líquido de Fermi, $A_{a\sigma}(\varepsilon_F)$ la podemos escribir como una función de la ocupación electrónica total del DPC. En el régimen de acoplamiento débil entre los electrodos y el PC a , o altas temperaturas $\Delta = \Delta_I + \Delta_D \ll k_B T$ ($\Delta_\nu = \pi \sum_k |V_{k\nu}|^2 \delta(\varepsilon_{k\nu}) = \pi \rho V^2$ con V independiente de k , y ρ la densidad local

de estados en el sitio de la impureza), podemos calcular la conductancia a través del sistema, a bajo orden en $\Delta/k_B T$, reemplazando en la ecuación 1.9 la densidad espectral exacta del DPC aislado de los conductores:

$$A_{a\sigma}(\varepsilon) = \frac{1}{Z} \sum_{i,j} (e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) |\langle \Psi_j | a_{\sigma}^{\dagger} | \Psi_i \rangle|^2 \times \delta[\varepsilon - (E_j - E_i)], \quad (2.7)$$

donde $|\Psi_i\rangle$ y E_i son las autofunciones y autoenergías exactas del DPC, y $Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$ es la función de partición con $\beta = 1/k_B T$. Reemplazando esto en la ecuación 1.9,

$$G = \frac{e^2}{\hbar} \frac{\Delta}{K_B T} \sum_{i,j} (P_i + P_j) f(E_i - E_j) f(E_j - E_i) \times \sum_n |\langle \Psi_j | a_{\sigma}^{\dagger} | \Psi_i \rangle|^2 \quad (2.8)$$

donde $P_i = e^{-\beta E_i}/Z$.

2.3. Resultados perturbativos en el régimen de acoplamiento débil

En esta sección analizaremos la conductancia a través del DPC en el régimen de acoplamiento débil a los electrodos donde la energía térmica $k_B T$ es más grande que la energía de hibridación Δ . En este régimen, Δ se puede tratar perturbativamente, y los electrodos servirían como una prueba espectroscópica del DPC en las medidas de transporte. Los mapas de conductancia son generados al cambiar los voltajes de compuerta de cada PC (parametrizado aquí por \mathcal{N}_a y \mathcal{N}_b) los cuales modifican la carga total sobre el DPC y la distribución de carga entre los PCs. Para un DPC en el régimen espectroscópico, esperamos una estructura hexagonal en los mapas de conductancia donde los picos de conductancia ocurren en voltajes de compuerta tales que hay una degeneración de carga sobre el DPC el cual permite fluctuaciones de carga entre el DPC y los conductores [63]. Aquí, la conductancia sólo es sensible a fluctuaciones de carga sobre el PC a , ya que éste es el que está conectado a los conductores. Como podemos inferir de la ecuación 2.8, para obtener una gran conductancia, al menos dos niveles del DPC que difieren en su carga por un electrón, necesitan estar cuasidegenerados ($|E_i - E_j| \leq k_B T$ tal que el producto de las funciones de Fermi no se supriman exponencialmente). Además el electrón debe estar fluctuando térmicamente dentro y fuera del PC a (así el elemento de matriz $|\langle \Psi_j | a_{\sigma}^{\dagger} | \Psi_i \rangle|^2$ es importante).

En lo que sigue, nos enfocaremos en el análisis de un DPC que tiene tres niveles sobre el PC b con niveles de energía $\tilde{\varepsilon}_{b1} = -\delta$, $\tilde{\varepsilon}_{b2} = 0$, y $\tilde{\varepsilon}_{b3} = \delta$. Este modelo simplificado presenta, en el régimen de acoplamiento débil, muchas de las características observadas en sistemas que tienen un número grande de niveles sobre el PC lateral (ver

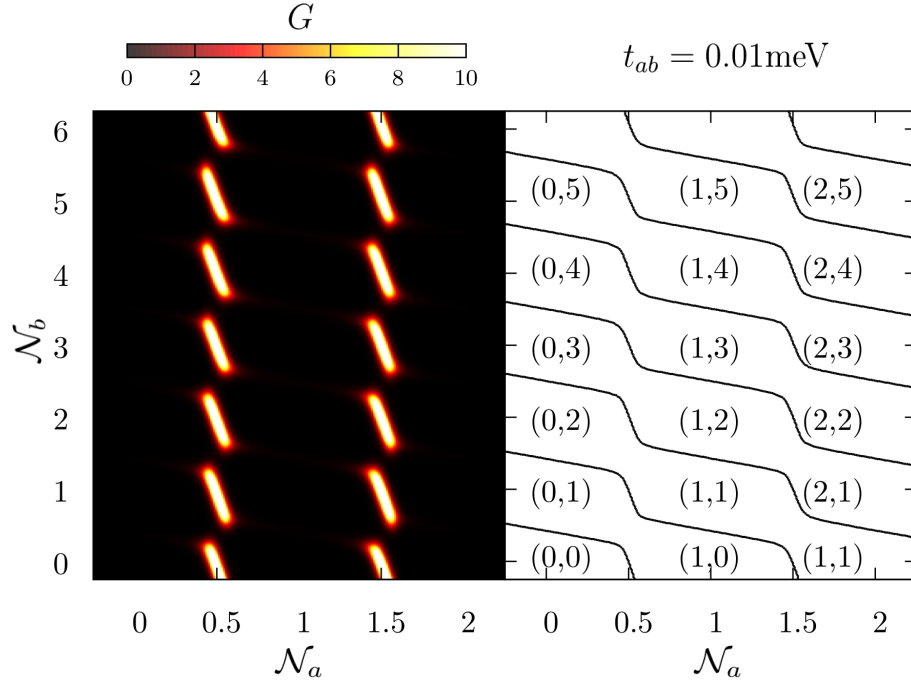


Figura 2.3: Panel izquierdo: mapa de conductancia para un dispositivo de DPC acoplados lateralmente. El acoplamiento entre PCs es $t_{ab} = 0,01 \text{ meV}$. Los otros parámetros son $U_b = 0,25 \text{ meV}$, $U_a = 0,7 \text{ meV}$, $U_{ab} = 0,1 \text{ meV}$, $\delta = 0,02 \text{ meV}$, y $k_B T = 0,01 \text{ meV}$. Panel derecho: carga total del DPC aislado para los mismos parámetros y compuertas de voltaje como en el mapa de conductancia del panel izquierdo. Las líneas indican un cambio en un electrón en la carga del estado base del DPC aislado. El DPC está vacío en la esquina inferior izquierda de la figura, y está ocupada con ocho electrones en la esquina superior derecha. La ocupación aproximada de cada PC está indicado entre paréntesis como $(\langle \hat{N}_a \rangle, \langle \hat{N}_b \rangle)$.

Ref. [3]). Para simplificar la discusión de los resultados, consideraremos que t_{ab}^α es independiente del nivel y así suprimimos el índice α .

Calculamos el mapa de conductancia del DPC en el régimen espectroscópico usando la ecuación 2.8 y diagonalizamos el hamiltoniano del DPC aislado para obtener sus autoestados y autoenergías para cada valor de N_a y N_b . En las figuras 2.3, 2.4 y 2.5 presentamos los resultados para un conjunto de parámetros obtenidos de los experimentos de Baines [3] y diferentes valores del acoplamiento túnel t_{ab} entre los PCs. En el régimen de acoplamiento débil entre los PCs ($t_{ab} < \delta$), hay poca mezcla entre los estados de los PCs (excepto cuando hay niveles de energía degenerados en los dos PCs) y generalmente, la carga de los PCs está bien definida. Debido a la topología del dispositivo, en las líneas de degeneración del PC a aparece un pico en la conductancia, ya que éste es el que está acoplado a los electrodos. Esto se observa en el panel izquierdo de la figura 2.3 donde obtenemos segmentos de alta conductancia en las líneas de degeneración de carga del DPC, que coinciden con los del PC a . Como podemos ver en el panel derecho de la figura 2.3 estos segmentos de alta conductancia están asociados a un cambio de carga en el PC a . En esta figura la ocupación aproximada de cada PC en diferentes regiones del mapa está indicada entre paréntesis $(\langle \hat{N}_a \rangle, \langle \hat{N}_b \rangle)$. El cambio

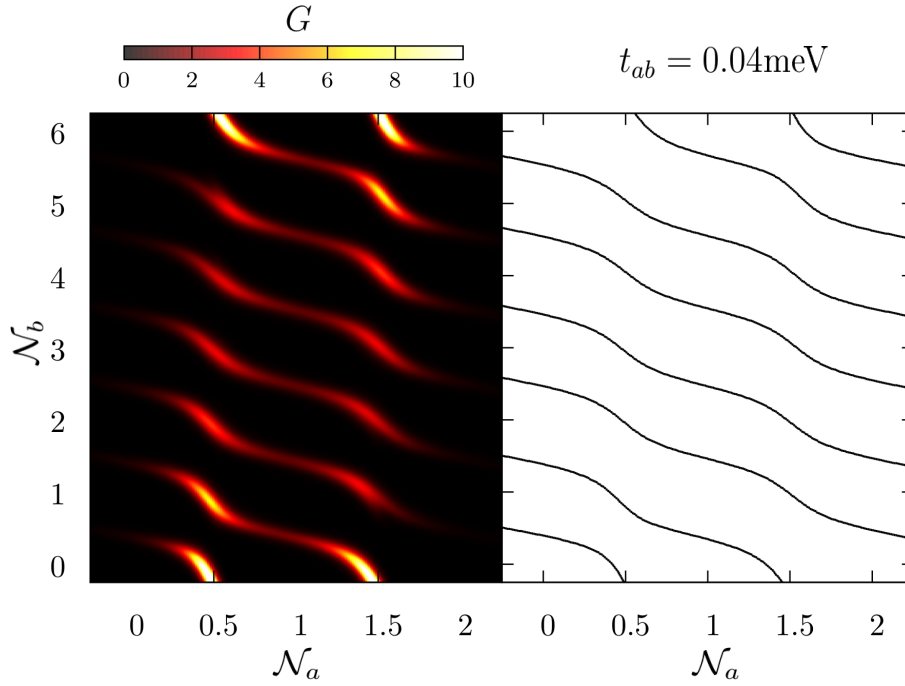


Figura 2.4: Panel izquierdo: mapa de conductancia para $t_{ab} = 0,04\text{meV}$. Panel derecho: las líneas indican una degeneración de carga sobre el DPC aislado, la carga del DPC cambia por uno en cada línea e incrementa desde cero en la esquina izquierda inferior a ocho en la esquina derecha superior. Los otros parámetros son como en la figura 2.3.

en la carga del PC b está acompañado por picos muy débiles en la conductancia debido a una pequeña mezcla entre los estados de los PCs.

Para un acoplamiento intermedio entre PCs ($t_{ab} \sim \delta$, ver figura 2.4), los estados del DPC están en un régimen molecular donde la carga en cada PC no está bien definida debido a que todos los estados del DPC están conformados por una gran mezcla orbital entre los PCs. Esto es reflejado en el mapa de conductancia que presenta máximos en los puntos de degeneración de carga del DPC donde la carga total del DPC cambia (como indica el panel derecho de la figura). Los PCs pierden su identidad y se comportan como un solo PC con una energía de carga efectiva y un acoplamiento efectivo a los conductores.

Para grandes valores del acoplamiento entre PCs ($t_{ab} > \delta$) el sistema entra gradualmente a un régimen, en el cual, algunas de las funciones de onda presentan una fuerte mezcla entre los PCs y otros están mayoritariamente localizados en uno de los PCs [3]. Para el modelo simplificado con un solo nivel en el PC a y tres niveles en el PC b , un nivel de energía está asociado a un estado ligado (bonding en inglés) entre el nivel del PC a y una combinación simétrica de los niveles del PC b , y otro nivel está asociado al estado antiligado (antibonding en inglés) correspondiente. El estado ligado tiene aproximadamente $1/2$ de peso en cada PC cuando la ocupación total es 1. Los otros dos estados del DPC tienen la mayoría de peso sobre el PC b . Esta estructura electrónica particular del DPC está reflejada en la conductancia del dispositivo como

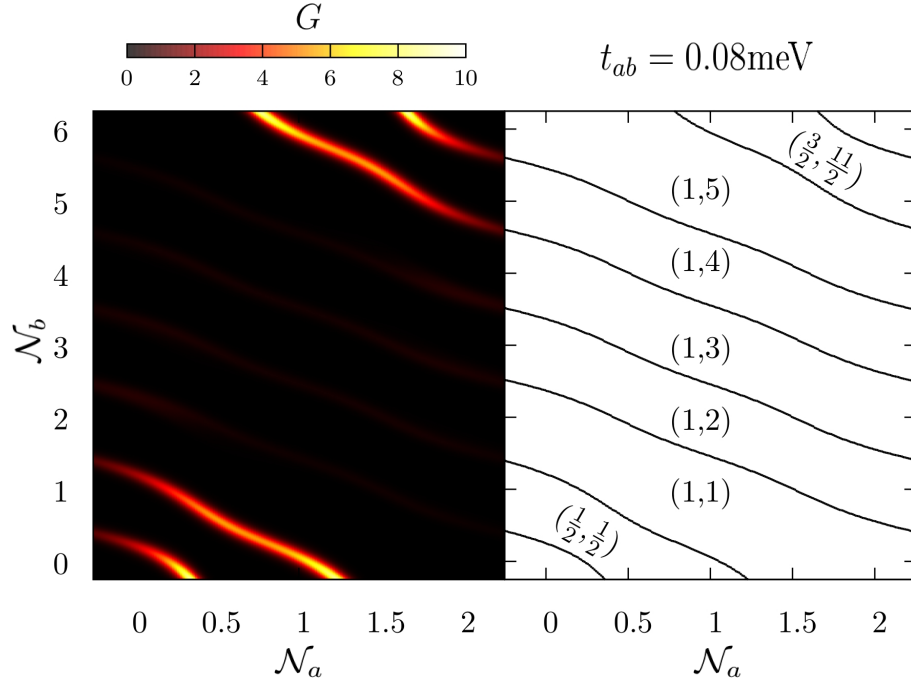


Figura 2.5: Panel izquierdo: mapa de conductancia para $t_{ab} = 0,08 \text{ meV}$. Panel derecho: las líneas indican una degeneración de carga sobre el DPC aislado, la carga del DPC cambia por uno en cada línea e incrementa desde cero en la esquina inferior izquierda a ocho en la esquina superior derecha. La ocupación aproximada de cada PC está indicado entre paréntesis para diferentes regiones del mapa. Los otros parámetros son como en la figura 2.3.

podemos ver en la figura 2.5. Los picos de conductancia alta ocurren cuando el estado ligado (estado base) y antiligado (estado de más alta energía) cambian su ocupación y los picos de baja conductancia se obtienen cuando los dos estados principalmente localizados en el PC b se cargan.

Esta estructura peculiar de las funciones de onda en el régimen de acoplamiento fuerte entre PCs la podemos entender en el límite no interactuante o en el límite de capacitancia alta donde $U_a = U_b = U_{ab}$ (ver Ref [3]). Esto aparece en el caso general donde consideramos más niveles sobre cada PC. En el último caso, algunos de los estados del DPC están fuertemente hibridizados entre los dos PCs, siendo una combinación de muchos orbitales de cada PC. El resto de estados del DPC están mayoritariamente localizados sobre el PC a o sobre el PC b . El valor del acoplamiento t_{ab} para el cual el cambio de comportamiento del régimen molecular y el de acoplamiento fuerte entre PCs toma lugar, depende del espaciamiento entre niveles δ y el valor relativo entre las interacciones de Coulomb U_a , U_b y U_{ab} . Para $U_a = U_b = U_{ab}$ la energía de interacción dada por la ecuación 2.2 depende únicamente del número total de electrones sobre el DPC y es independiente de la estructura de las funciones de onda electrónicas. Para $U_a, U_b > U_{ab}$, los estados fuertemente hibridizados entre los PCs tienen una mayor energía de interacción que los que tienen un número bien definido de electrones en cada PC.

En la próxima sección, analizamos la conductancia a bajas temperaturas en diferentes regímenes de acoplamiento túnel entre PCs. Como mostraremos, los mapas de conductancia en el límite de temperatura cero son solamente determinados por la ocupación total N del DPC y un parámetro que mide la asimetría del acoplamiento entre el PC a y los conductores. Esto nos permite una estimación directa de la conductancia a temperatura cero desde los diagramas de carga presentados en los paneles izquierdos de las figuras 2.3, 2.4 y 2.5.

2.4. Resultados exactos a temperatura cero

Suponiendo que el estado base del sistema es un líquido de Fermi, demostramos en el apéndice A que la densidad espectral del PC a a temperatura cero está dado en la energía de Fermi (tomaremos la energía de Fermi $\varepsilon_F = 0$) por

$$A_{a\sigma}(0) = \frac{2}{\pi\Delta} \sin^2(\pi N_\sigma), \quad (2.9)$$

donde

$$N_\sigma = -\frac{1}{\pi} \text{ImTr} \int_{-\infty}^0 \mathbf{G}_\sigma(\omega) d\omega, \quad (2.10)$$

es la carga total por espín sobre el DPC y $\mathbf{G}_\sigma(\omega)$ es la función de Green local a temperatura cero del DPC (ver apéndice A). Reemplazando la ecuación 2.9 en la ecuación 1.9 obtenemos

$$G(T=0) = \tilde{\alpha} \sum_{\sigma} \frac{e^2}{h} \sin^2(\pi N_\sigma), \quad (2.11)$$

donde $\tilde{\alpha} = \frac{4\Delta_I\Delta_D}{(\Delta_I+\Delta_D)^2}$.

Para un acoplamiento simétrico del PC a a los electrodos izquierdo y derecho ($\Delta_I = \Delta_D$) tenemos que $\tilde{\alpha} = 1$ y la conductancia a temperatura cero alcanza dos cuantos de conductancia¹ cuando el número de electrones N en el DPC es impar ($N_\uparrow = N_\downarrow = N/2$). Consecuentemente, para un número par de electrones en el DPC la conductancia es cero. Este importante resultado indica que la amplitud máxima de la conductancia está dada solamente por la asimetría de los acoplamientos a los conductores derecho e izquierdo, y la dependencia con respecto a los otros parámetros, incluyendo la energía de carga, niveles de energía y acoplamientos túnel, entran solamente a través del valor de la ocupación del DPC. Para $\tilde{\alpha}$ fijo, todo el conjunto de parámetros que conducen a una ocupación dada en el DPC conducirá al mismo valor de conductancia a temperatura cero.

Los mapas de conductancia analizados en la sección previa son completamente modificados en el límite de temperatura cero. Independientemente de la distribución

¹Un cuanto de conductancia es igual a e^2/h .

de carga dentro del DPC, la conductancia será $\sim \tilde{\alpha} 2e^2/h$ en los valles donde el número total de electrones es impar, y muy pequeña cuando el número total de electrones es par. En el régimen de Kondo, donde la hibridación Δ es más pequeña que las interacciones locales U_a y U_b , la ocupación como una función de los voltajes de compuerta se aproxima a la ocupación del DPC aislado de los conductores cuando se está lejos de los puntos de degeneración de carga. En los puntos de degeneración de carga, la carga promedio del DPC es $N = k + 1/2$, donde k es un entero, y la conductancia a $T = 0$ es $2e^2/h$. Basados en el cálculo de la ocupación total como los que presentamos en los paneles derechos de las figuras 2.3, 2.4 y 2.5, veremos que los mapas de conductancia a $T = 0$ tienen franjas horizontales de alta conductancia (delimitado por las líneas de degeneración de carga) alternados con franjas de baja conductancia.

En la próxima sección mostraremos que las temperaturas donde el sistema se comporta como un líquido de Fermi para dar origen a la ecuación 2.11, en algunos casos puede ser extremadamente baja. A temperaturas intermedias, la conductancia puede ser muy diferente del valor esperado en el régimen de altas temperaturas y bajas temperaturas. Dependiendo del valor de los voltajes de compuerta (por ejemplo, en diferentes regiones del mapa de conductancia), el sistema puede estar en el régimen espectroscópico o en el régimen de bajas temperaturas para un conjunto dado de parámetros.

La ecuación 2.11 es válida para las interacciones consideradas en el hamiltoniano de la ecuación 2.1. Es importante mencionar que diferentes interacciones de las ya consideradas (por ejemplo, un acoplamiento Hund en uno de los PCs) puede cambiar la naturaleza del estado base y el valor de la conductancia a temperatura cero [22–24, 28, 68–75].

2.5. Resultados numéricos

Ahora discutiremos la dependencia en temperatura de la conductancia. Primero revisaremos los resultados principales para el caso con un solo nivel relevante en cada PC. Este problema ya ha sido estudiado usando una variedad de técnicas incluyendo NRG [41, 55] y grupo de renormalización funcional [76]. Consideremos la situación simétrica donde $\Delta_I = \Delta_D = \Delta/2$, $\tilde{\epsilon}_{D\alpha} = 0$, $\mathcal{N}_a = \mathcal{N}_b = 1$, y $U_{ad} = 0$, tal que la carga promedio sobre cada PC es 1. Cuando ambos PCs están en el régimen de Kondo ($U_a, U_b \gg \pi\Gamma, t_{ab}$) las fluctuaciones de carga sobre cada PC las podemos eliminar usando una transformación Schrieffer-Wolff [77], y las propiedades de baja energía del sistema las calculamos usando un hamiltoniano de Kondo:

$$H_K = J_K \mathbf{S}_a \cdot \mathbf{s}_0 + J_{ab} \mathbf{S}_a \cdot \mathbf{S}_b + H_{el}. \quad (2.12)$$

Aquí, \mathbf{S}_ℓ con $\ell = a, b$ son operadores de espín asociados a los PCs, y $\mathbf{s}_0 = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} c_{0s}^\dagger \sigma_{s,s'} c_{0s'}$ es la densidad de espín electrónica de un conductor efectivo (aquí los conductores I y D fueron mapeados a un solo conductor que está asociado a la combinación simétrica de los conductores I y D con un acoplamiento efectivo Δ) sobre el orbital acoplado al PC a . Las constantes de acoplamiento a segundo orden en H_t y H_V , son $J_{ab} = 8t_{ab}^2/(U_a + U_b)$ y $J_K = 2\Delta/U_a$.

Para un acoplamiento entre PCs (J_{ab}) suficientemente débil, el sistema presenta dos efectos Kondo a diferentes escalas de energía. Como la temperatura disminuye, el espín $1/2$ del PC es apantallado por los electrones de los conductores debido al efecto Kondo a una temperatura T_K (ver ecuación 1.3). Como ya mencionamos en la sección 1.3, las excitaciones de baja energía tienen un comportamiento de líquido de Fermi que viven en un ancho de banda $\sim k_B T_K$ dado por la amplitud del pico de Kondo en el nivel de Fermi de la densidad espectral. Aquí la conductancia incrementa a través del dispositivo cuando la temperatura disminuye.

Para $J_{ab} < T_K$ el espín del PC b es apantallado a una temperatura más baja dada por [41]:

$$T_K^* \sim T_K e^{-\frac{\pi k_B T_K}{J_{dD}}}. \quad (2.13)$$

Esta expresión la podemos interpretar como un apantallamiento Kondo del espín $1/2$ del PC b por las cuasipartículas asociadas al efecto Kondo en el PC a con una densidad de estados de cuasipartícula dada por $\rho_{ef} \sim 1/\pi k_B T_K$. Mientras el primer efecto Kondo conduce a un incremento en la conductancia del dispositivo, el segundo efecto Kondo suprime la conductancia, el cual concuerda con el resultado de la ecuación 2.11. Esta supresión de la conductancia la podemos entender como una antirresonancia de Fano [78] o como un efecto de bloqueo en la conductancia debido a la formación de un singlete fuerte entre los espines de los dos PCs a bajas energías. Para $J_{ab} > T_K$ los espines de los PCs están también en un estado singlete no solamente a bajas temperaturas, sino también para $T > T_K$. La conductancia es pequeña para $T < J_{ab}$ y el apantallamiento Kondo no toma lugar. Variando el voltaje de compuerta del PC a para modificar su ocupación a ~ 0 o ~ 2 , se produce un solo efecto Kondo con un acoplamiento Kondo efectivo que conduce a un régimen de conductancia alta a bajas temperaturas [79]. Cuando el PC b está vacío o doblemente ocupado y el PC a está en el régimen de Kondo, las propiedades de transporte están dominadas por el efecto Kondo sobre el PC a .

Como presentaremos abajo, las características principales observadas en el caso de un solo nivel para la dependencia en temperatura de la conductancia, las observamos también cuando consideramos múltiples niveles en el PC b . Calculamos la conductancia a través del sistema y la susceptibilidad magnética usando FDM-NRG y en todos los cálculos usamos el parámetro de discretización $\Lambda = 10$ y el z-trick promediando sobre

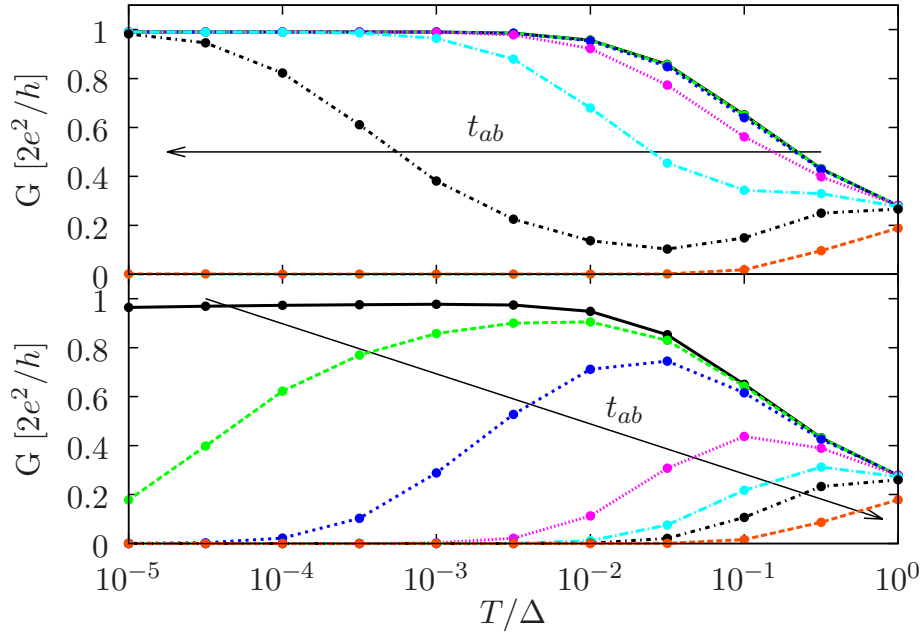


Figura 2.6: Conductancia para diferentes valores del acoplamiento túnel entre PCs $t_{ab} = 0,01, 0,015, 0,02, 0,03, 0,04, 0,05$, y $0,09$ meV. Los otros parámetros son $U_b = 0,25$ meV, $U_a = 0,7$ meV, $U_{ab} = 0,1$ meV, $\delta = 0,02$ meV, and $\Delta = 0,2$ meV. a) Ocupación total de tres electrones: $\mathcal{N}_a = 1$ y $\mathcal{N}_b = 2$. b) Ocupación total de cuatro electrones: $\mathcal{N}_a = 1$ y $\mathcal{N}_b = 3$.

cuatro valores de $z = 0,25, 0,5, 0,75$ y 1 . Retenemos 5000 estados a partir de la cuarta iteración del NRG.

En la figura 2.6 graficamos la conductancia como función de la temperatura para el sistema multinivel analizado en la sección previa. En el panel superior de la figura 2.6 consideramos una situación con un solo electrón en el PC a y ~ 2 electrones en el PC b . En $t_{ab} \leq 0,02$ meV los resultados son muy similares a los observados cuando los dos PCs están desacoplados ($t_{ab} = 0$): hay un incremento en la conductancia asociado al apantallamiento Kondo del espín $1/2$ del PC a . La conductancia logra el cuanto de conductancia, como esperamos de las predicciones de líquido de Fermi. En este régimen, la temperatura de Kondo es débilmente reducida por la presencia del PC b . A medida que t_{ab} incrementa, la temperatura de Kondo va decreciendo, la cual establece la escala de temperatura en que se recobra el comportamiento de líquido de Fermi. Esta reducción de la temperatura de Kondo la podemos entender recordando el análisis de la naturaleza de las funciones de onda electrónica en diferentes regímenes del acoplamiento entre PCs presentados en la sección 2.3. Para $t_{ab} = 0$ dos electrones ocupan el estado base del PC b formando un singlete y hay un solo electrón en el PC a , una situación que permanece esencialmente inalterada para $t_{ab} \ll \delta$. Para $t_{ab} > \delta$, sin embargo, esto llega a ser energéticamente favorable ocupar los niveles más altos de energía del PC b para incrementar la hibridación con el PC a . En este régimen, el peso de la función de onda sobre el PC a asociado al espín $1/2$ se reduce y en consecuencia también se reduce el acoplamiento Kondo entre el PC a y los conductores. Cuando se

incrementa t_{ab} , la estructura de niveles del DPC cambia (ver también Ref. [3]). Dos electrones ocupan el estado más bajo de energía del DPC el cual es un estado ligado entre el orbital sobre el PC a y una combinación lineal de los orbitales del PC b . El tercer electrón está principalmente localizado sobre el PC b que conduce a una fuerte supresión del acoplamiento Kondo y así, una supresión exponencial de la temperatura de Kondo. Para valores más altos de t_{ab} , la temperatura de Kondo toma valores muy por de bajo del rango accesible experimentalmente (ver panel superior de la figura 2.6).

En el panel inferior de la figura 2.6 consideramos una situación con un solo electrón en el PC a y tres electrones en el PC b . En este caso, la teoría de líquido de Fermi predice que la conductancia va a cero cuando la temperatura va a cero. El estado base del DPC aislado tiene un espín total igual a cero. Como en el caso de un solo nivel en el PC b , si la diferencia de energía entre el estado singlete y triplete ² del DPC es más pequeño que la temperatura de Kondo para el PC a , se producen dos efectos Kondo cuando disminuye la temperatura. Primero el espín 1/2 del PC a es apantallado por los electrones de los conductores y las excitaciones de baja energía del sistema las podemos describir por medio de un líquido de Fermi local de quasipartículas pesadas en el PC a . Después, un segundo efecto Kondo aparece a más baja energía, donde el espín 1/2 del PC b es apantallado por las quasipartículas Kondo sobre el PC a . El apantallamiento Kondo del espín del PC b produce un decremento de la conductancia debajo de una temperatura característica T_K^* la cual depende fuertemente del acoplamiento antiferromagnético entre los PCs (ver ecuación 2.13). Este comportamiento se puede observar en el panel inferior de la figura 2.6 donde vemos que para los valores más bajos de t_{ab} , la conductancia presenta un comportamiento no monótono. Cuando incrementamos el acoplamiento entre los PCs, la temperatura de Kondo del segundo efecto Kondo incrementa exponencialmente. Para valores suficientemente grandes de t_{ab} el acoplamiento antiferromagnético de los PCs excede T_K , de tal manera que no se forma el efecto Kondo y la conductancia decrece monótonicamente. Mientras que de forma cualitativa, el comportamiento de la conductancia es la misma como en el caso para un solo nivel en el PC b , el valor de la temperatura de Kondo para el segundo efecto Kondo puede variar fuertemente cuando consideramos multiples niveles en el PC b . Como presentaremos en la próxima sección, la temperatura de Kondo del segundo efecto Kondo tiene una fuerte dependencia con el espaciamiento entre niveles δ del PC b .

Los resultados de la figura 2.6 describen cualitativamente el comportamiento de la conductancia lejos de las líneas de degeneración de carga en los valles con un número par o impar de electrones sobre el DPC. Las escalas de temperatura para los diferentes regímenes, sin embargo, pueden variar fuertemente desde un valle a otro. Esto lo mos-

²En este caso, el estado triplete es un estado altamente correlacionado de espín total igual a uno.

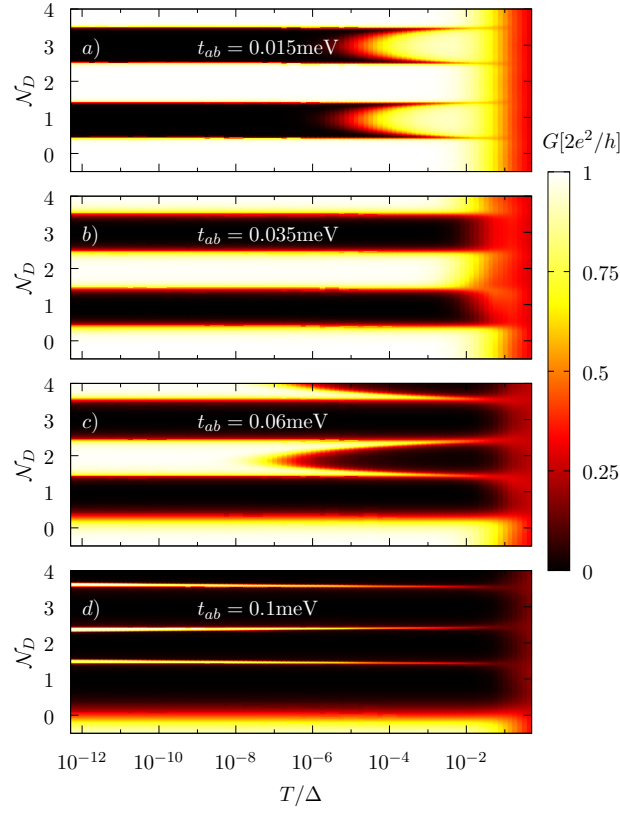


Figura 2.7: Mapa de conductancia para $\mathcal{N}_a = 1$ y para diferentes valores de t_{ab} . Los otros parámetros son como en la figura 2.6. Observamos una asimetría par-impar en la conductancia a bajas temperaturas.

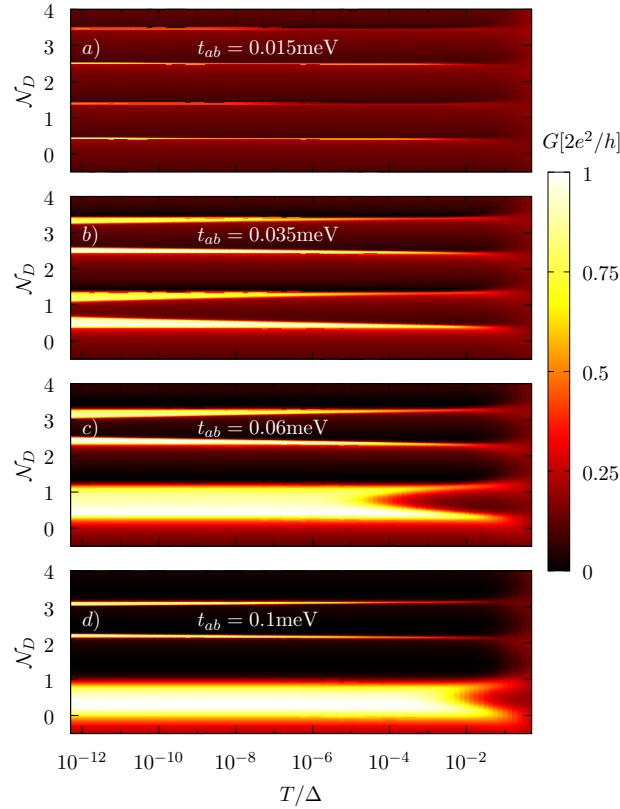


Figura 2.8: Lo mismo que en la figura 2.7 pero con $\mathcal{N}_a = 0,2$.

tramos en las figuras 2.7 y 2.8 donde graficamos el comportamiento de la conductancia en función de la temperatura y \mathcal{N}_b para $\mathcal{N}_a = 1$ y $\mathcal{N}_a = 0,2$, respectivamente. Para $\mathcal{N}_a = 1$ y un acoplamiento entre PCs débil ($t_{ab} = 0,015\text{meV}$), observamos una clara asimetría par-impar en la conductancia a bajas temperaturas cuando la ocupación del PC b cambia con el voltaje de compuerta. obtenemos una conductancia grande (pequeña) para los valles con un número impar (par) de electrones en el DPC. Sin embargo, hay un régimen de temperatura intermedia $T_K^* < T < T_K$ donde se pierde la asimetría par-impar. El comportamiento de la conductancia en este régimen de parámetros se describe cualitativamente por el hamiltoniano de la ecuación 2.12.

Para $t_{ab} = 0,035\text{meV}$ el DPC está en un régimen molecular, y no observamos el segundo efecto Kondo. El sistema se comporta como un solo PC que presenta un efecto Kondo para un número impar de electrones sobre el DPC. En el régimen de Kondo, podemos desarrollar una transformación de Schrieffer-Wolff [77] para obtener el acoplamiento Kondo que es determinado por la energía de carga efectiva del DPC y el momento magnético del PC a en la función de onda del estado base del DPC aislado. Para valores más grandes de t_{ab} la temperatura de Kondo para algunos valles es fuertemente suprimida ya que el orbital sobre el PC a se hibridiza fuertemente con una combinación de los orbitales sobre el PC b y las otras funciones de onda están principalmente localizadas sobre el PC b . El valle impar con $\mathcal{N}_b \sim 0$ está asociado con el estado ligado entre los PCs y tiene una temperatura de Kondo grande. Sin embargo, para los valles en $\mathcal{N}_b = 2,4$, el momento magnético está principalmente localizado en el PC b conduciendo a una temperatura de Kondo muy pequeña, la cual está muy por debajo del rango de temperatura numéricamente explorado (excepto para valores de \mathcal{N}_b cercanos a los puntos de degeneración de carga).

La conductancia para $\mathcal{N}_a = 0,2$ la graficamos en la figura 2.8. Para este caso esperamos que la conductancia sea grande a temperatura cero, para valores impares de \mathcal{N}_b . Para un acoplamiento entre PCs bajo $t_{ab} = 0,015\text{meV}$ [ver la figura 2.8a)], la temperatura de Kondo está muy por debajo del rango de temperaturas numéricamente explorado. Cuando incrementamos t_{ab} , la temperatura de Kondo también aumenta y llega a ser más alta que la temperatura mínima considerada cerca a los puntos de degeneración de carga [ver la figura 2.8b)]. Para valores grandes de t_{ab} [ver las Figs. 2.8c) y d)] la temperatura de Kondo para $\mathcal{N}_b \sim 1$ aumenta a medida que se va formando el estado ligado. En los valles con $\mathcal{N}_b \sim 3$, la temperatura de Kondo llega hasta un máximo en el régimen molecular $t_{ab} \sim \delta$, y llega a ser fuertemente suprimida para valores grandes de t_{ab} ya que la probabilidad de encontrar el momento magnético del DPC en el PC b aumenta.

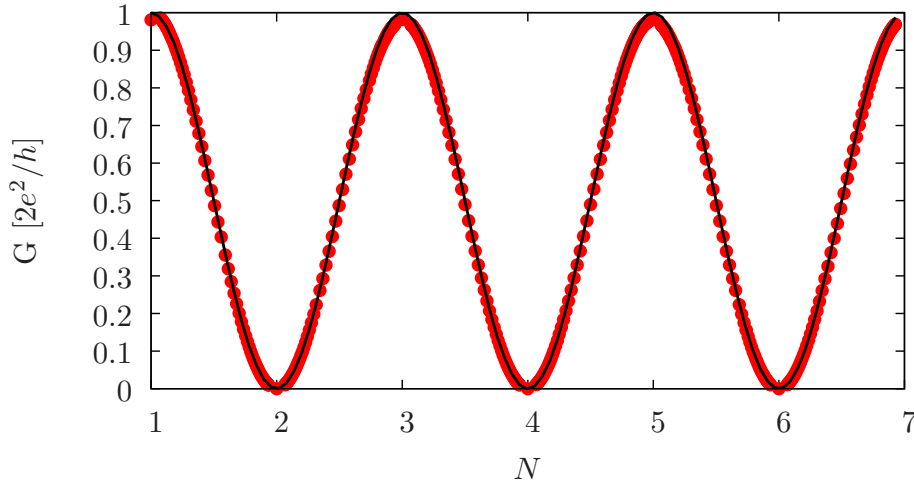


Figura 2.9: Conductancia en función de la ocupación total del DPC para tres niveles en el PC b . Los puntos sólidos son resultados del NRG, y la línea es el resultado analítico de la ecuación 2.11. El voltaje de compuerta en el PC a lo escogimos tal que la ocupación promedio es uno, mientras que el voltaje de compuerta del PC b es variado para cambiar su ocupación desde cero a seis electrones. Los parámetros son $\mathcal{N}_a = 1$, $U_a/\Delta = U_b/\Delta = 7,143$, $U_{ab} = 0$, $t_{ab}/\Delta = 0,0693$, $\delta/\Delta = 0,001428$, y $\Delta = 0,07$ en unidades del semiancho de la banda de conducción de los conductores.

2.6. Efecto Kondo en puntos cuánticos multinivel

En esta sección analizaremos el efecto de tener muchos niveles electrónicos sobre el PC b en las propiedades de transporte del dispositivo y sobre las correlaciones Kondo en el régimen del segundo efecto Kondo. Consideramos pocos niveles sobre el PC b y calculamos la conductancia para un rango completo de valores del espaciamiento de energía δ . Ya que tendremos un número finito de niveles, el límite cuando el espaciamiento entre niveles tiende a cero ($\delta \rightarrow 0$), describe un PC b de tamaño finito con un estado base degenerado. Analizaremos el sistema del DPC en un régimen de parámetros diferentes a los anteriormente estudiados. Escogemos $U_a = U_b = U$, $U_{ab} = 0$, y $t_{ab} \ll U$. Las interacciones de Coulomb determinan la distribución de carga en el DPC, y en particular no se favorece el estado ligado obtenido en el régimen en que $t_{ab} > \delta$ debido a la ausencia de la repulsión de Coulomb entre los PCs ($U_{ab} = 0$). Esto lo podemos ver fácilmente al calcular el valor de expectación del término de energía de interacción (ecuación 2.2) para una función de onda del DPC con un solo electrón en cada PC o los dos electrones en el estado ligado.

Primero probaremos la validez de la ecuación 2.11 para un sistema que tiene tres niveles cuasidegenerados ($\delta \ll t_{ab}$) sobre el PC b calculando la conductancia con NRG. Chequeamos que el procedimiento de renormalización tuvo convergencia a puntos fijos de baja energía para calcular la conductancia y la ocupación. En la figura 2.9 presentamos los resultados. El voltaje de compuerta del PC a lo mantuvimos fijo ($\mathcal{N}_a = 1$) y la ocupación sobre el PC b la cambiamos desde cero hasta seis, por medio de su voltaje de compuerta. Vemos que hay una excelente concordancia con las predicciones de líquido

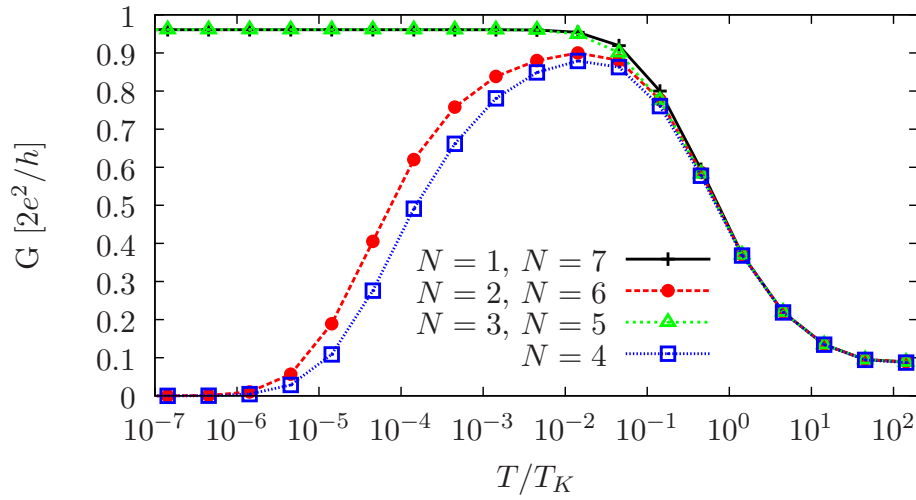


Figura 2.10: Conductancia para diferentes valores de la ocupación en el DPC. Para una ocupación par, la conductancia es suprimida en $T < T_K^*$ debido al segundo efecto Kondo. Los parámetros son como en la figura 2.9.

de Fermi. Las pequeñas discrepancias entre el resultado numérico y el analítico es debido a una pequeña pérdida de peso espectral en la solución numérica. Cabe resaltar que obtuvimos resultados idénticos a los observados en la figura 2.9 para un amplio rango de parámetros del modelo.

La figura 2.10 presenta la conductancia en función de la temperatura para diferentes valores de la ocupación total del DPC y con los mismos parámetros de la figura 2.9. Para un número impar de electrones en el DPC, la ocupación por espín es $N_\sigma = N/2$ y la ecuación 2.11 conduce a la conductancia máxima a temperatura cero $G(T = 0) = 2e^2/h$. El incremento en la conductancia cuando la temperatura disminuye está asociado a la presencia de correlaciones de Kondo que producen un apantallamiento del espín del PC a . Las propiedades de transporte son esencialmente inalteradas por la presencia del PC b cuando este tiene una carga par de electrones. Para un número total par de electrones en el DPC, aparecen los dos efectos Kondo, como en el caso de un solo nivel en el PC b , y la conductancia a temperatura cero, cae a cero. La temperatura del segundo efecto Kondo depende generalmente del número de electrones sobre el PC b , y es la misma para una ocupación total en el DPC de N y $8 - N$ electrones debido a la simetría electrón-hueco para el conjunto de parámetros considerados.

Ahora vamos a considerar el efecto del espaciamiento de niveles δ sobre la segunda temperatura de Kondo T_K^* . Cuando hay un solo electrón en el PC b , hay dos casos límite que pueden ser resueltos. Para $\delta \rightarrow \infty$ hay un solo nivel relevante sobre el PC b y el problema se reduce al caso de un solo nivel. Para $\delta = 0$, desarrollamos un cambio de base sobre el estado base degenerado del PC b , tal que H_t acopla el nivel del PC a a solamente uno de los estados de la nueva base, es decir, a la combinación simétrica

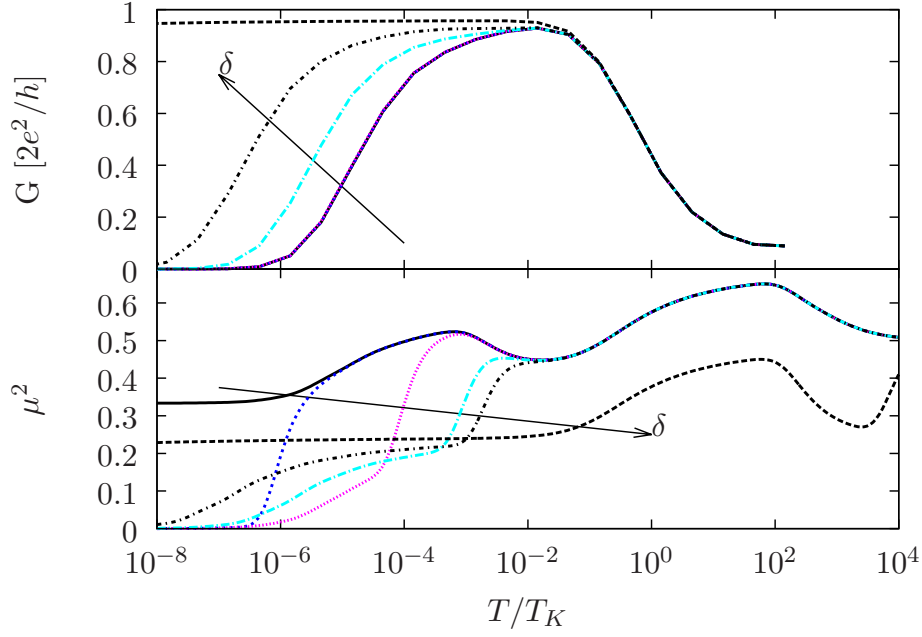


Figura 2.11: Conductancia (panel superior) y momento magnético efectivo al cuadrado (panel inferior) como función de la temperatura para diferentes valores del espaciamiento de energía δ/T_K^* ($\delta = 0$), 0,004, 0,4, 3,6, 7,2 y $\delta \rightarrow \infty$ sobre el PC b . Los otros parámetros son como la Fig 2.9. Solamente para $\delta > T_K^*$ ($\delta = 0$) hay un cambio considerable de T_K^* .

de los orbitales del PC b ,

$$H_t = \sqrt{n_b} t_{ab} \sum_{\sigma} \left(a_{\sigma}^{\dagger} \tilde{b}_{\sigma} + h.c. \right) \quad (2.14)$$

donde $\tilde{b}_{\sigma} = \sum_{\alpha} b_{\alpha\sigma} / \sqrt{n_b}$, y n_b es la degeneración del estado base. El problema se reduce de nuevo al caso de un solo nivel pero con una amplitud de acoplamiento túnel más grande $\tilde{t}_{ab} = \sqrt{n_b} t_{ab}$. Desarrollando transformaciones de Schrieffer-Wolff al problema de un solo nivel, obtenemos que $J_{ab}(\delta = 0) = n_b J_{ab}(\delta \rightarrow \infty)$, el cual conduce a una segunda temperatura de Kondo mucho más grande en el caso de $\delta = 0$ [$T_K^*(\delta = 0) \gg T_K^*(\delta \rightarrow \infty)$].

Esperamos que haya un cambio de comportamiento desde una temperatura de Kondo grande a una pequeña cuando δ incrementa desde cero. Desarrollando transformaciones de Schrieffer-Wolff en un sistema con dos niveles en el PC b obtenemos el hamiltoniano para el DPC aislado a primer orden en H_t y δ/U

$$\begin{aligned} H_{ab} = & J_1 \mathbf{S}_a \cdot \mathbf{S}_{b1} + J_2 \mathbf{S}_a \cdot \mathbf{S}_{b2} + \delta \sum_{\sigma} b_{2\sigma}^{\dagger} b_{2\sigma} \\ & + J_{12} \left[\sum_{\sigma} b_{2\sigma}^{\dagger} b_{1\sigma} \mathbf{S}_a \cdot \mathbf{S}_{b1} + \sum_{\sigma} b_{1\sigma}^{\dagger} b_{2\sigma} \mathbf{S}_a \cdot \mathbf{S}_{b2} \right] \end{aligned} \quad (2.15)$$

con

$$\begin{aligned} J_1 &= 4 \frac{t_{ab}^2}{U} \\ J_2 &= J_1 \left(1 + \frac{\delta^2}{U^2} \right) \\ J_{12} &= \frac{J_1 + J_2}{2} \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde $\mathbf{S}_{b\ell}$, con $\ell = 1, 2$, son operadores de espín asociados a los niveles del PC b .

Como presentaremos más tarde, el cambio de comportamiento desde una temperatura de Kondo grande a una pequeña no ocurre en $\delta \sim J_1$, como ingenuamente podría ser inferido desde un análisis del DPC aislado, sino a una escala de energía más pequeña $\delta \sim T_K^*(\delta = 0)$.

En la figura 2.11 graficamos la conductancia y el momento magnético al cuadrado μ^2 del DPC como una función de la temperatura para diferentes valores del espaciamiento de energía en el PC b . Los parámetros son los mismos que en la figura 2.10 y el número de electrones en el PC b es impar (3). El sistema presenta dos efectos Kondo como podemos observar en la figura. La conductancia incrementa a temperaturas por debajo de la primera temperatura de Kondo la cual es esencialmente independiente de δ . La segunda temperatura de Kondo T_K^* decrece cuando δ aumenta pero solamente cuando δ excede $T_K^*(\delta = 0)$. Podemos notar que para $\delta \rightarrow \infty$, la segunda temperatura de Kondo cae por debajo de un mínimo de temperatura numéricamente explorado.

Para $\delta = 0$, el momento magnético al cuadrado presenta dos jorobas asociadas a los dos efectos Kondo. A altas temperaturas cada nivel contribuye a μ^2 , en unidades de $(g_e \mu_B)^2$, con $1/8$, y en promedio $\mu^2 = 0,5$. Para $k_B T \sim U$ se forma el momento magnético en el PC a con un aporte a μ^2 de $1/4$, y en el PC b sólo sobreviven estados con ocupación 3³ con un aporte de $9/20$, así en total $\mu^2 = 0,7$. Cuando $T \sim T_K$, μ^2 disminuye debido al apantallamiento del espín del PC a y $\mu^2 = 9/20 = 0,45$. A más baja temperatura, se forma un momento magnético en el nivel del PC b que corresponde a la combinación simétrica de sus orbitales, ya que éste es el que se acopla al PC a para ganar una energía de $\sim 3t^2/U$ por debajo de los dos estados con ocupación cero y doblemente ocupados. Esto hace que a temperaturas del orden de $\sim 3t^2/U$, los estados cero y doblemente ocupados sean desechados. La combinación simétrica aporta a μ^2 con $1/4$, y los dos niveles restantes que no se acoplan al PC a contribuyen con $1/3$, ya que hay 6 posibles estados, de los cuales, dos de ellos (con proyección de espín 1 y -1) contribuyen a μ^2 . En este caso $\mu^2 = 0,583$. Para $T \sim T_K^*$ hay una bajada de μ^2 debido a que las cuasipartículas del primer efecto Kondo apantallan el momento local formado en el PC b , y así el único aporte a μ^2 proviene de los dos electrones localizados en

³El resto está suprimido por el factor de Boltzmann.

los dos niveles no apantallados, por tanto $\mu^2 = 1/3 = 0,333$ y permanece constante a más bajas temperaturas. En el caso en que $\delta \neq 0$, hay dos regímenes, uno para $T \gg \delta$, donde μ^2 sigue la misma física del caso $\delta = 0$, y otro para $T \ll \delta$, donde la contribución de los dos niveles desacoplados es cero (un nivel está doblemente ocupado, y el otro está suprimido por el factor de Boltzmann) presentando un cambio de comportamiento rápido entre estos dos regímenes como una función de la temperatura en contraste con la decaída suave del apantallamiento Kondo.

Como mencionamos en la sección previa, en el régimen del segundo efecto Kondo, uno puede considerar que el momento magnético sobre el PC b se acopla a un líquido de Fermi renormalizado de cuasipartículas formado por el apantallamiento Kondo del momento magnético del PC a . En la próxima sección supondremos que el primer efecto Kondo está bien desarrollado y exploraremos el cambio de comportamiento de T_K^* como una función de δ usando la teoría de bosones esclavos en la aproximación de campo medio.

2.6.1. Teoría de campo medio (bosones esclavos)

Nuestro punto de partida es el hamiltoniano de la ecuación 2.15 para un sistema con dos niveles sobre el PC b y un solo electrón sobre cada PC. Suponemos que el primer efecto Kondo está bien desarrollado y tomamos la densidad de estados local sobre el PC a como una banda no interactuante con una densidad de estados efectiva $\rho_{ef} \sim 1/\pi k_B T_K$ y un ancho de banda de $\pi k_B T_K$.

Por simplicidad consideramos $\delta \ll U$ y tomamos $J_1 = J_2 = J_{12} = J$. El hamiltoniano resultante es

$$H_{ml} = J \left[\mathbf{S}_b \cdot \mathbf{s}'_0 + \sum_{\sigma} b_{2\sigma}^{\dagger} b_{1\sigma} \mathbf{S}_{b1} \cdot \mathbf{s}'_0 + \sum_{\sigma} b_{1\sigma}^{\dagger} b_{2\sigma} \mathbf{S}_{b2} \cdot \mathbf{s}'_0 \right] \quad (2.17)$$

$$+ \delta \sum_{\sigma} b_{2\sigma}^{\dagger} b_{2\sigma} + H'_{el}, \quad (2.18)$$

donde $\mathbf{S}_b = \mathbf{S}_{b1} + \mathbf{S}_{b2}$ y $\mathbf{s}'_0 = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} f_{0s}^{\dagger} \sigma_{s,s'} f_{0s'}$ es la densidad de espín electrónica de las cuasipartículas del líquido de Fermi donde f_{0s}^{\dagger} (f_{0s}) crea (destruye) una cuasipartícula sobre el PC a , y

$$H'_{el} = \sum_{\nu,k,\sigma} \epsilon'_k f_{\nu k \sigma}^{\dagger} f_{\nu k \sigma}. \quad (2.19)$$

Las interacciones bicuadráticas entre los pseudofermiones generados por las interacciones espín-espín se pueden desacoplar al introducir dos campos bosónicos Q_i (conjugado a la amplitud $\sum_{\sigma} b_{i\sigma}^{\dagger} f_{0\sigma}$ con $i = 1, 2$) y una restricción sobre la ocupación del PC b por medio de un multiplicador de Lagrange λ . La energía libre expresada en términos de los campos bosónicos tiene un punto de silla (mínimo de energía) en el que estos

últimos se condensan, $\langle Q_i \rangle = \langle Q_i^\dagger \rangle = q_i = \langle f_{0\sigma} b_{i\sigma}^\dagger \rangle$. En el punto de silla el hamiltoniano efectivo es (ver apéndice B)

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \tilde{J} \sum_{\sigma, \alpha} (b_{\alpha\sigma}^\dagger f_{0\sigma} + h.c.) + \delta b_{2\sigma}^\dagger b_{2\sigma} \\ &+ \sum_{\sigma, \alpha} \lambda (b_{\alpha\sigma}^\dagger b_{\alpha\sigma} - 1) + H'_{el}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

donde $\tilde{J} = J(q_1 + q_2)$. Usando las ecuaciones de movimiento de los operadores $b_{i\sigma}$ (ver apéndice B) obtenemos:

$$q_1 = -\frac{1}{\pi} \int_{-T_K}^{T_K} d\omega f(\omega) \text{Im} \left[\tilde{\mathbf{G}}_{01\sigma} \right], \quad (2.21)$$

$$q_2 = -\frac{1}{\pi} \int_{-T_K}^{T_K} d\omega f(\omega) \text{Im} \left[\tilde{\mathbf{G}}_{02\sigma} \right], \quad (2.22)$$

$$N_i = -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \text{Im} \left[\tilde{\mathbf{G}}_{ii\sigma} \right], \quad (2.23)$$

donde $N_i = \sum_{\sigma} \langle b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} \rangle$ es la ocupación de los diferentes niveles del PC b , $\tilde{\mathbf{G}}_{ii\sigma}$ y $\tilde{\mathbf{G}}_{0i\sigma}$ son las funciones de Green en el i ésimo nivel del PC b y el correlador de las cuasipartículas con cada nivel del PC b respectivamente. Éstas son dadas por (ver apéndice B)

$$\tilde{\mathbf{G}}_{\sigma} = \begin{pmatrix} \frac{i}{\pi \rho_{\text{ef}}} & \tilde{J} & \tilde{J} \\ \tilde{J} & \omega - \lambda & 0 \\ \tilde{J} & 0 & \omega - \delta - \lambda \end{pmatrix}^{-1}, \quad (2.24)$$

donde usamos que $\sum_k 1/(w - \epsilon'_k) \approx -i\pi\rho_{\text{ef}}$ [19].

Las integrales en las ecuaciones 2.21 a 2.23 las resolvimos analíticamente a $T = 0$, y las ecuaciones resultantes de esta integración las calculamos numéricamente para las ocupaciones de los niveles del PC b y la temperatura de Kondo $T_K^* = \tilde{\Delta} = \pi\rho_{\text{ef}}\tilde{J}^2$ (ver apéndice B). Los resultados los graficamos en la figura 2.12 donde observamos un cambio de comportamiento suave desde una temperatura de Kondo grande $T_K^*(\delta = 0) = \frac{T_K}{2}e^{-\frac{\pi T_K}{2J}}$ a una temperatura de Kondo pequeña $T_K^*(\delta \rightarrow \infty) = \frac{T_K}{2}e^{-\frac{\pi T_K}{J}}$. Para $\delta \geq T_K^*(\delta = 0)$ las ocupaciones de los niveles N_1 y N_2 se empiezan a diferenciar, y para $\delta \gg T_K^*(\delta = 0)$ solamente el nivel más bajo está ocupado.

Si asociamos una ganancia de energía $\sim T_K^*$ a la formación del efecto Kondo, para δ pequeño es energéticamente favorable ocupar parcialmente el nivel de energía más alto del PC b formando una combinación simétrica de los dos niveles del PC b para incrementar la hibridación con el PC a y así la temperatura de Kondo. La energía en este caso es $\sim -T_K^*(\delta = 0) + \delta/2$. Sin embargo, para $\delta > 2T_K^*(\delta = 0)$ es energéticamente

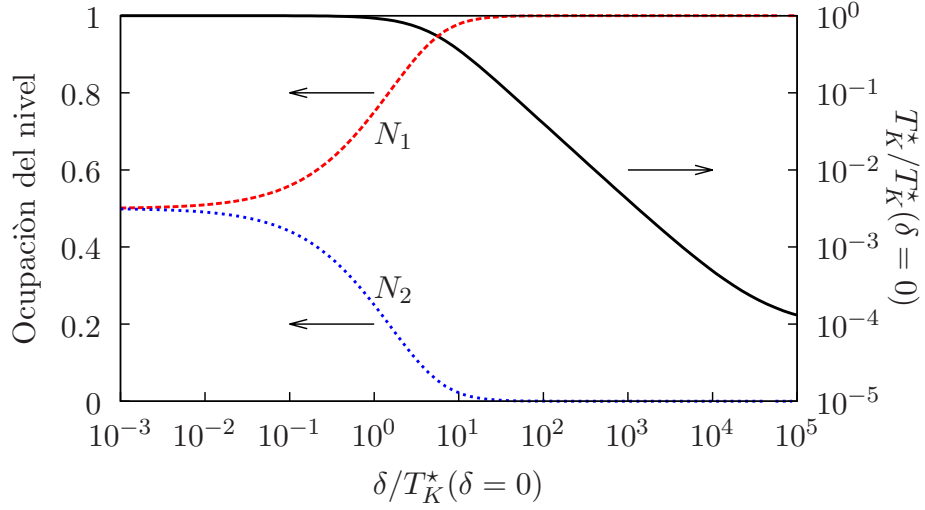


Figura 2.12: Resultados de la teoría de campo medio de bosones esclavos para la ocupación del nivel y la temperatura de Kondo como una función del espaciamiento de energía δ en el PC b . Para $\delta > T_K(\delta = 0)$, llega a ser energéticamente más favorable formar las correlaciones de Kondo con el nivel de más baja energía. Esto reduce el acoplamiento de intercambio con los electrones del baño, y así también se reduce la temperatura de Kondo.

favorable desocupar el nivel de más alta energía ($N_2 \rightarrow 0$) a expensas de tener ganancia de energía más baja debido al efecto Kondo $-T_K^*(\delta \rightarrow \infty)$. Por tanto, se evidencia un cambio de comportamiento entre los dos regímenes para $\delta \sim T_K^*(\delta = 0)$.

Capítulo 3

Efecto Kondo subapantallado y ferromagnético en arreglos de puntos cuánticos

3.1. Introducción

Los modelos de Kondo ferromagnético y subapantallado son ejemplos de problemas de impurezas cuánticas donde las propiedades de baja energía no pueden ser descritas usando teorías de líquido de Fermi [20, 80]. En estos modelos, un momento magnético local se desacopla asintóticamente a bajas energías de un reservorio electrónico no interactuante, lo que conduce a un comportamiento singular en las propiedades termodinámicas, dinámicas y de transporte de la impureza [22, 24, 74, 75, 81–83]. El momento magnético resultante, asintóticamente libre, es extremadamente sensible a un campo magnético externo, por lo que se puede polarizar fácilmente a temperatura cero, tal como veremos en el siguiente capítulo. El rompimiento de la degeneración de espín por el campo magnético hace que cambie la naturaleza del estado base a un régimen de líquido de Fermi. Esta extrema sensibilidad a campos externos podría ser usada en dispositivos nanoscópicos para controlar el transporte eléctrico y térmico y generar corrientes de espín [29].

La física de Kondo subapantallado se ha estudiado recientemente en junturas moleculares de espín 1 y en PCs multinivel, donde los electrodos tienen un solo canal relevante (no cuenta el espín) para el proceso de apantallamiento en un amplio rango de temperaturas [23, 68, 73, 84]. Sin embargo, en estos sistemas, el acoplamiento a un segundo canal no se puede descartar por consideraciones de simetría. También se han presentado estudios teóricos que muestran que en dispositivos que están conformados por tres PCs en una configuración de estrella ¹ conducen a un modelo de

¹Esta configuración es análoga a la que presentamos en la figura 3.1.

Kondo ferromagnético de espín $1/2$ [25–28]. La fabricación en un laboratorio de tal dispositivo permitiría la primera observación de la física de Kondo ferromagnética. En este capítulo mostramos que al adicionar varios PCs acoplados lateralmente a otro PC central (este último está acoplado a dos electrodos), se puede usar para construir, bajo los parámetros apropiados, el modelo de Kondo ferromagnético para un espín $L = (N - 1)/2$, donde N es el número de PCs acoplados lateralmente, y el modelo de Kondo subapantallado para un espín $S = N/2$.

En el régimen en que el acoplamiento entre el PC central y los electrodos es débil en comparación al acoplamiento entre el PC central y los laterales, las propiedades a bajas energías son dominadas por el estado base multidegenerado del arreglo de los PCs aislados de los electrodos, el cual, como presentaremos abajo, tiene espín $L = (N - 1)/2$ y está acoplado ferromagnéticamente a los electrodos. En el régimen opuesto, el momento magnético del PC central es apantallado a través de un efecto Kondo regular conduciendo a un líquido de Fermi local de cuasipartículas [20]. Los PCs laterales forman un espín $S = N/2$ que está acoplado antiferromagnéticamente al PC central. Para apantallar completamente el momento magnético a través de un apantallamiento Kondo se necesitarían $2S$ canales de electrones de conducción. Mostraremos que sólo hay un canal de conducción y por lo tanto sólo puede apantallar parcialmente este espín. En ambos regímenes y en el cruce entre ellos hay un momento magnético local asintóticamente libre $L = (N - 1)/2$ a bajas energías.

Calculamos numéricamente las propiedades del dispositivo poniendo hasta 5 PCs laterales, y obtenemos un comportamiento logarítmico en las propiedades dinámicas y termodinámicas en los regímenes de Kondo ferromagnético y subapantallado, y en el cruce entre ellos.

Publicamos los siguientes resultados en [85].

3.2. Modelo

Consideramos $N + 1$ PCs con un solo nivel relevante en cada PC ² acoplados en una configuración de estrella (ver la figura 3.1). El dispositivo es descrito por el siguiente hamiltoniano [28]:

$$H = H_C + H_t + H_V + H_{el} . \quad (3.1)$$

Aquí H_C describe la interacción electrostática sobre los PCs,

$$H_C = \sum_{\ell=0}^N \left(\varepsilon_{\ell} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{n}_{\ell\sigma} + U_{\ell} \hat{n}_{\ell\uparrow} \hat{n}_{\ell\downarrow} \right) , \quad (3.2)$$

²Para un PC suficientemente pequeño, las propiedades de transporte están gobernadas por su orbital desocupado más bajo o por su orbital ocupado más alto.

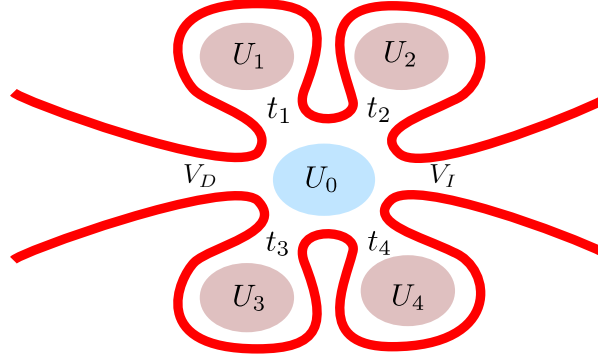


Figura 3.1: Representación esquemática de un dispositivo conformado por cinco PCs en una configuración de estrella. Las energías de carga U_ℓ y los acoplamientos túnel t_ℓ para cada PC están indicadas en la figura. V_D y V_I son los acoplamientos túnel de los electrodos derecho e izquierdo al PC central, respectivamente.

donde $\hat{n}_{\ell\sigma} = d_{\ell\sigma}^\dagger d_{\ell\sigma}$ es el operador número del electrón del ℓ -ésimo PC, $U_\ell > 0$ es su energía de carga, y σ la proyección de espín a lo largo del eje \hat{Z} . La energía del nivel se puede controlar externamente por medio de un voltaje de compuerta $V_{g\ell}$, $\varepsilon_\ell \simeq -C_{g\ell}V_{g\ell}$, donde $C_{g\ell}$ es la capacitancia del PC ℓ con su correspondiente electrodo de compuerta.

$$H_t = \sum_{\sigma} \sum_{\ell=1}^N \left(t_\ell d_{\ell\sigma}^\dagger d_{0\sigma} + h.c. \right), \quad (3.3)$$

describe el acoplamiento túnel entre el PC central ($\ell = 0$) y los N PCs laterales. Finalmente,

$$H_V = \sum_{\nu=D,I} \sum_{k,\sigma} \left(V_{k\nu} d_{0\sigma}^\dagger c_{\nu k\sigma} + h.c. \right), \quad (3.4)$$

describe el acoplamiento túnel entre el PC central y los electrodos derecho (D) e izquierdo (I), los cuales son modelados por dos gases de Fermi no interactuantes como en la ecuación 2.4.

3.3. Hamiltonianos a baja energía

3.3.1. Impureza desacoplada de los conductores

Primero analizaremos la naturaleza de los autoestados del hamiltoniano $H_{PC} = H_C + H_t$, el cual describe el sistema de los PCs desacoplados de los electrodos. Nos enfocamos en el régimen de un solo electrón promedio en cada PC, y desarrollamos una transformación de Schrieffer-Wolff [válida para $\varepsilon_\ell < 0$, $\varepsilon_\ell + U_\ell > 0$ y $t_\ell \ll \min(|\varepsilon_\ell|, \varepsilon_\ell + U_\ell)$] para desacoplar los estados vacío y doblemente ocupado de alta energía sobre cada PC.

A segundo orden sobre el término de acoplamiento túnel H_t , el hamiltoniano que-

da de la siguiente forma $H_{PC} = H_J + H_W + H_C$ donde H_W describe interacciones densidad-densidad entre el PC central y los laterales [77], y H_J describe la interacción de intercambio entre el PC central y los laterales:

$$H_J = \sum_{\ell=1}^N J_\ell \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_\ell. \quad (3.5)$$

$\mathbf{S}_\ell = \sum_{\sigma\sigma'} d_\ell^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'}}{2} d_{\ell\sigma'}$ y σ es un vector compuesto por las matrices de Pauli $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. Los acoplamientos antiferromagnéticos están dados por

$$J_\ell = 8t_\ell^2 \left(\frac{U_0 + U_\ell}{(U_0 + U_\ell)^2 - 4(\varepsilon_0 - \varepsilon_\ell)^2} \right). \quad (3.6)$$

Para el hamiltoniano de espín de la ecuación 3.5, podemos definir dos subredes donde no haya interacción entre espines en la misma subred, una formada por el PC central (subred A) y otra formada por los PCs laterales (subred B). Bajo estas condiciones, el teorema de Lieb-Mattis [86] postula que el estado base del sistema tiene espín total $\mathbf{L} = |S_A - S_B|$, donde S_A (S_B) es el valor máximo posible del espín total de la subred A (B). Esto implica que el estado base del sistema de los PCs aislados tendrán un espín total $\mathbf{L} = (N - 1)/2$.

Si consideramos acoplamientos idénticos $J_\ell = J$ entre los PCs, el hamiltoniano de espín se reduce a un acoplamiento de intercambio ferromagnético $H_J \rightarrow J \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_D$ entre el espín del PC central y el espín total de los PCs laterales $\mathbf{S}_D = \sum_{\ell=1}^N \mathbf{S}_\ell$ y ésto lo podemos resolver analíticamente. Los autoestados de H_J los obtenemos al adicionar el momento angular de las dos subredes $\mathbf{L} = \mathbf{S}_0 + \mathbf{S}_D$. Usando $J \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_D = J(L^2 - S_D^2 - S_0^2)/2$ obtenemos los correspondientes autovalores:

$$E_{L=S_D \pm \frac{1}{2}} = -\frac{J}{2} (\mp(S_D + \frac{1}{2}) + \frac{1}{2}). \quad (3.7)$$

El mínimo de energía se obtiene cuando \mathbf{S}_D toma su máximo valor posible, o sea $\mathbf{S}_D = N/2$, el cual resulta en $L = (N - 1)/2$ como era de esperarse del teorema de Lieb-Mattis. El autoestado correspondiente es

$$\begin{aligned} |L, L_m\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2S_D + 1}} \left(\sqrt{S_D + L_m + \frac{1}{2}} |\downarrow\rangle |S_D, L_m + \frac{1}{2}\rangle \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{S_D - L_m + \frac{1}{2}} |\uparrow\rangle |S_D, L_m - \frac{1}{2}\rangle \right), \end{aligned} \quad (3.8)$$

donde $S_D = N/2$, $|\sigma\rangle$ y $|S_D, S_z\rangle$ son los autoestados de S_0^2 y S_D^2 respectivamente, con proyecciones σ y S_z a lo largo del eje \hat{z} , y L_m es la proyección del momento angular total a lo largo del mismo eje.

3.3.2. Hamiltoniano de Kondo ferromagnético

En esta subsección, adicionaremos los acoplamientos a los electrodos y presentaremos que, bajo los parámetros adecuados, el modelo de Kondo ferromagnético para un impureza de espín $\mathbf{L} = (N - 1)/2$ describe la dinámica de espín a baja energía del dispositivo con $N + 1$ PCs. Para este fin, es conveniente reescribir el acoplamiento del PC central y los electrodos (ver ecuación 3.4) como

$$H_V = V \sum_{\sigma} \left(d_{0\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma} + h.c. \right), \quad (3.9)$$

$V = \sqrt{\sum_{k\nu} |V_{k\nu}|^2}$ y $c_{1\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{k\nu} V_{k\nu} c_{k\nu\sigma}$ destruye un electrón sobre el estado $|\Psi_1\rangle$ de los electrodos acoplados al PC central.

Para calcular el acoplamiento ferromagnético, desarrollamos teoría de perturbaciones en H_V (transformadas de Schrieffer-Wolff) despreciando términos de potenciales de dispersión y reteniendo solamente el acoplamiento magnético de los electrones de la banda y el estado base multidegenerado del arreglo de PCs aislados (ver ecuación 3.8). Siguiendo la notación y el procedimiento de la referencia [28] para $J_{\ell} = J$ obtenemos el acoplamiento de intercambio que está dado por

$$J_K = \frac{\langle L, L_m + 1 | d_{0\uparrow}^{\dagger} \frac{1}{H_{PC} - E_g} d_{0\downarrow} - d_{0\downarrow} \frac{1}{H_{PC} - E_g} d_{0\uparrow}^{\dagger} | L, L_m \rangle}{\sqrt{(L + \frac{1}{2})^2 - (L_m + \frac{1}{2})^2}},$$

donde $L = S_D - 1/2 = (N - 1)/2$, $E_g = E_{L=S_D-1/2}$, y hemos despreciado la energía de los electrones de conducción, ya que es muy pequeña comparada con la energía de carga. Finalmente obtenemos un acoplamiento ferromagnético

$$J_K = -\frac{16V^2}{(N + 1)(J(N + 2) + 2U_0)}, \quad (3.10)$$

para el hamiltoniano de Kondo

$$H_K = J_K \mathbf{L} \cdot \mathbf{s} + H_{el}, \quad (3.11)$$

donde $\mathbf{s} = \sum_{\sigma\sigma'} c_{1\sigma}^{\dagger} \frac{\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'}}{2} c_{1\sigma'}$ es el operador de espín del estado localizado de los electrodos. Este resultado extiende el análisis de $N = 2$ de Baruselli *et al.* [28] a cualquier valor de N , suponiendo que el estado base multidegenerado de los PCs aislados es solamente relevante a bajas energías. Como veremos abajo, esto no es el caso si el acoplamiento a los electrodos es fuerte.

Para presentar esto, desarrollamos transformaciones de Schrieffer-Wolff tomando H_V como perturbación sin proyectar al estado base multidegenerado de los PCs aisla-

dos. Obtenemos el siguiente hamiltoniano

$$H_1 = \sum_{\ell=1}^N J_\ell \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_\ell + J_V \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{s} + H_{el}, \quad (3.12)$$

donde $J_V = 8V^2/U_0$ es un acoplamiento antiferromagnético. Para llegar a la ecuación 3.12, hemos descartado términos de potencial de dispersión por simplicidad, y hemos supuesto que $NJ_\ell \ll U_0$. En el caso en el cual $J_\ell = J \gg J_V$, la física de baja energía está dominada por el estado base del arreglo de PCs aislados, y proyectamos H_1 en sus estados multidegenerados como: $H_1 \rightarrow \langle m|H_1|m' \rangle$ donde $|m\rangle \equiv |L, L_m\rangle$. Después de la proyección, el primer término de H_1 es una constante que descartamos. La proyección del segundo término se puede evaluar usando el siguiente resultado basado en el teorema de Wigner-Eckart [87]:

$$\langle m|\mathbf{S}_0|m' \rangle = \frac{\langle m|\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{L}|m \rangle}{L(L+1)} \langle m|\mathbf{L}|m' \rangle, \quad (3.13)$$

el cual para los estados de la ecuación 3.8 es

$$\langle m|\mathbf{S}_0|m' \rangle = -\frac{1}{N+1} \langle m|\mathbf{L}|m' \rangle. \quad (3.14)$$

El signo menos de los coeficientes de proporcionalidad entre \mathbf{S}_0 y \mathbf{L} conduce a un acoplamiento ferromagnético $J_K = -J_V/(N+1)$ entre \mathbf{s} y \mathbf{L} recobrando así el hamiltoniano H_K como en la ecuación 3.11. Es de notar, sin embargo, que para calcular J_V hemos supuesto $NJ \ll U_0$. Si este no fuese el caso, obtendríamos $J_V = \frac{16V^2}{(N+2)J+2U_0}$ y recobramos el acoplamiento Kondo de la ecuación 3.10 para el caso de $J_\ell = J$.

En la situación general en que los J_ℓ no son todos idénticos, el hamiltoniano H_J ya no conmuta con S_D^2 . El estado base del arreglo de los PCs aislados (descrito por la ecuación 3.5) es, para un dado L_m , una superposición de los N estados que tienen momento angular de espín $L = (N-1)/2$ de las cuales uno solo tiene $S_D = N/2$ mientras los $N-1$ estados restantes tienen $S_D = N/2 - 1$. Ésto lo podemos escribir como

$$|L\rangle = \cos \theta |L, S_D = \frac{N}{2}\rangle + \sin \theta |L, S_D = \frac{N}{2} - 1\rangle \quad (3.15)$$

donde θ es un número real. Proyectando H_1 dentro de este estado base, obtenemos un acoplamiento de Kondo:

$$J_K = \left(-\frac{\cos^2 \theta}{N+1} + \frac{\sin^2 \theta}{N-1} \right) J_V, \quad (3.16)$$

el cual, como presentaremos en la siguiente sección, es siempre ferromagnético y logra su máximo valor absoluto para acoplamientos uniformes ($J_\ell = J$). El mínimo valor

absoluto de J_K es cero y se obtiene en el límite donde uno de los acoplamientos J_ℓ domina sobre los otros (por ejemplo $J_{\ell \neq 1}/J_1 \rightarrow 0$).

3.3.3. Prueba de $J_K < 0$

En esta sección mostraremos que el acoplamiento Kondo de la ecuación 3.16 es siempre ferromagnético para cualquier valor de N y $J_\ell > 0$. Para calcular J_K de la ecuación 3.16, solamente necesitamos obtener el coeficiente θ de la función de onda de los PCs aislados (ver ecuación 3.15). Esto lo podemos calcular diagonalizando la matriz hamiltoniana de $N \times N$ asociada al subespacio del estado base, la cual es analítica para cualquier N solamente en pocos casos de alta simetría. Sin embargo, para mostrar que el acoplamiento es ferromagnético, es suficiente obtener una cota inferior para el valor de $\cos^2 \theta$. Para este fin, proponemos una función de onda del estado base de la forma

$$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |S_i\rangle, \quad (3.17)$$

donde α_i son números reales y los estados

$$|S_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\downarrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle - |\uparrow \cdots \uparrow \downarrow_i \cdots \uparrow\rangle \right), \quad (3.18)$$

son singletes entre el PC central y el i -ésimo PC lateral, con el resto de los espines paralelos. Aquí $|a_0 a_1 \cdots a_N\rangle$ es un estado en la base de Fock donde la proyección de espín a lo largo del eje \hat{z} para el espín $1/2$ de cada PC son dados por el a_ℓ . Los $|S_i\rangle$ forman una base no ortogonal del subespacio con momento angular total $L = (N-1)/2$. Dado lo anterior, un cálculo variacional en los α_i es exacto para la función de onda del estado base. Al aplicar H_J a la función de onda propuesta, obtenemos la siguiente combinación lineal de los $|S_i\rangle$:

$$H_J |\Psi\rangle = \sum_i \left\{ -\frac{3}{4} \alpha_i J_i + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \left(\alpha_i \frac{J_j}{2} - \alpha_j J_i \right) \right\} |S_i\rangle, \quad (3.19)$$

de la cual la energía variacional $E_{var} = \langle \Psi | H_J | \Psi \rangle$ es

$$E_{var} = -\frac{3}{4} \sum_i J_i \left\{ \sum_j \alpha_i \alpha_j + \frac{1}{6} \sum_{j \neq i, k \neq j, k \neq i} \alpha_j \alpha_k \right\}, \quad (3.20)$$

la cual tiene que ser minimizada bajo la restricción de normalización de la función de onda:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \left(\sum_i \alpha_i \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_i \alpha_i^2 = 1. \quad (3.21)$$

Ya que todos los coeficientes en forma cuadrática de la ecuación 3.20 tienen el mismo signo negativo, los α_i que minimizan esto deben tener el mismo signo y, sin pérdida de generalidad, podemos escogerlos positivos ($\alpha_i > 0$). Los coeficientes θ los calculamos al proyectar $|\Psi\rangle$ sobre el estado

$$|L_z = L, S_D = N/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{N(N+1)}} \sum_i |S_i\rangle, \quad (3.22)$$

el cual conduce a

$$\cos \theta = \langle \Psi | L_z = L, S_D = N/2 \rangle = \sqrt{\frac{N+1}{2N}} \sum_i \alpha_i. \quad (3.23)$$

Reemplazando el $\cos \theta$ calculado, en la ecuación 3.16 resulta en

$$J_K = \frac{J_V}{N-1} \left[1 - \left(\sum_i \alpha_i \right)^2 \right]. \quad (3.24)$$

Debido al carácter positivo de los α_i tenemos

$$\left(\sum_i \alpha_i \right)^2 = \sum_i \alpha_i^2 + \sum_i \sum_{j \neq i} \alpha_i \alpha_j \geq \sum_i \alpha_i^2, \quad (3.25)$$

el cual al usar la condición de normalización de la ecuación 3.21 conduce a $\sum_i \alpha_i^2 \leq 1$ y

$$\left(\sum_i \alpha_i \right)^2 \geq 1. \quad (3.26)$$

Combinando las ecuaciones 3.26 y 3.24, finalmente obtenemos que $J_K \leq 0$, demostrando que el acoplamiento siempre es ferromagnético. Cuando uno de los acoplamientos domina sobre los otros, $J_{\ell \neq 1}/J_1 \rightarrow 0$ tenemos $\alpha_1 = 1$, $\alpha_{\ell \neq 1} = 0$ y $J_K = 0$. El valor máximo de J_K en valor absoluto se obtiene cuando los acoplamientos son simétricos $J_\ell = J$ para los cuales $\alpha_\ell = \sqrt{\frac{2}{N(N+1)}}$ y $J_K = -J_V/(N+1)$.

3.3.4. Régimen del efecto Kondo en dos etapas

La proyección de H_1 al estado base multidegenerado de los PCs aislados lo podemos justificar si la diferencia de energía entre el estado base y el primer estado excitado es mucho más grande que el acoplamiento a los electrodos. En la situación opuesta donde $J_V \gg J_\ell$, la física a baja energía ya no puede ser descrita por el hamiltoniano de Kondo ferromagnético. Para $J_\ell \rightarrow 0$ el modelo se reduce al hamiltoniano de Kondo usual de espín 1/2 y el momento magnético local del PC central se apantalla a temperaturas

por debajo de la temperatura de Kondo [34]

$$T_K^0 = \frac{D}{k_B} \sqrt{\rho_0 J_V} \exp[-1/\rho_0 J_V], \quad (3.27)$$

donde D es el semiancho de banda de los electrones de conducción, y ρ_0 es la densidad local de estados de los electrodos en el estado efectivo $|\Psi_1\rangle$ evaluado en el nivel de Fermi. Como ya presentamos en la sección 1.3 y en 2.5, la densidad local de estados en el PC central presenta una resonancia de Abrikosov-Suhl de ancho $\sim k_B T_K^0$, y las propiedades a bajas energías pueden ser descritas por un líquido de Fermi de cuasipartículas. Si ahora retornamos al caso donde $J_\ell = J \ll k_B T_K^0$ los espines locales sobre los PCs laterales se acoplan antiferromagnéticamente al líquido de Fermi local renormalizado en el PC central. Esta situación ya ha sido analizada para el caso de $N = 1$ usando NRG y una aproximación de campo medio de bosones esclavos en la referencia [41]. La principal conclusión es que para $J < k_B T_K^0$ hay un segundo efecto Kondo con una temperatura característica:

$$T_K^* \sim T_K^0 \exp[-\pi k_B T_K^0 / J], \quad (3.28)$$

la cual corresponde a un efecto Kondo debido al acoplamiento antiferromagnético J entre un espín 1/2 y el líquido de Fermi formado en el PC central. Como presentaremos más tarde, para $N > 1$ la situación es análoga a el caso de $N = 1$ en el régimen de $J \ll k_B T_K^0$. La principal diferencia es que para $N = 1$ el espín sobre el PC lateral se apantalla completamente, mientras que para $N > 1$ el canal de electrones de conducción disponible en el PC central es incapaz de apantallar completamente los momentos magnéticos locales sobre los PCs laterales, conduciendo a un efecto Kondo subapantallado. Un análisis numérico presenta que la temperatura característica del efecto Kondo subapantallado está bien descrita por la ecuación 3.28.

3.4. Resultados numéricos

En esta sección, calculamos las propiedades termodinámicas y espectrales, por medio del método FDM-NRG y el truco z para mejorar la precisión en las propiedades a bajas temperaturas y tener alta resolución en las densidades espectrales respectivamente. Como antes, la hibridación entre el PC central y los electrodos es $\Delta = \pi \rho_0 V^2$ independiente de la energía dentro del rango $[-D, D]$, donde D es el semiancho de banda de los electrones de conducción en los electrodos. En lo que sigue, seleccionamos las unidades de energía tal que $D = 1$, y tomamos el nivel de Fermi en $\epsilon_F = 0$.

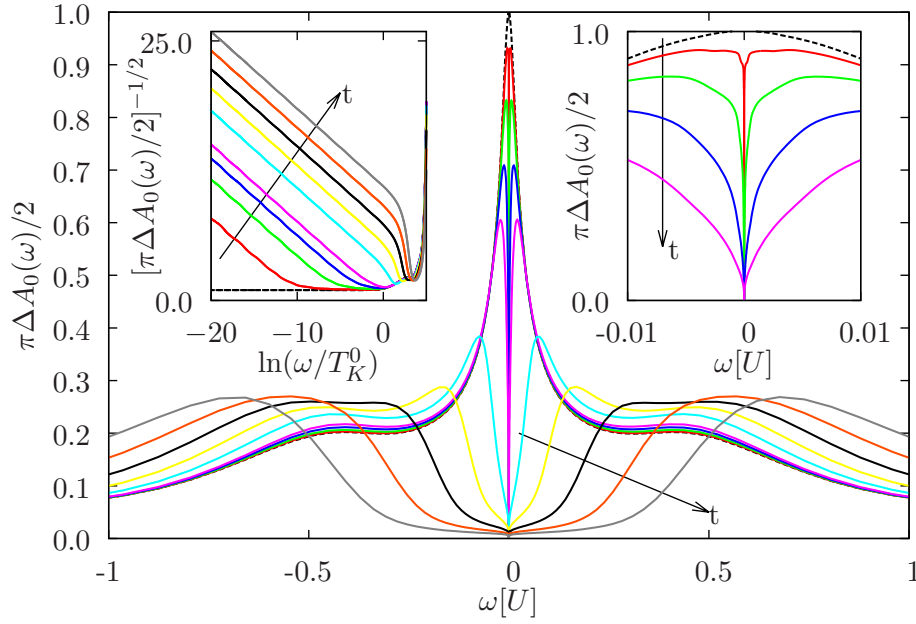


Figura 3.2: Densidad espectral del PC central acoplado a dos PCs laterales ($N = 2$). Los parámetros son $U_\ell = U = 0,4$, $\varepsilon_\ell = -U/2$, $\Delta = 0,04\pi$ y $t_\ell = t = 0, 0,015, 0,02, 0,025, 0,03, 0,05, 0,07, 0,09, 0,11$, y $0,13$. Recuadro izquierdo: gráfica de $A_0(\omega)^{-1/2}$ como función del $\ln(\omega)$ para clarificar el comportamiento singular de la densidad espectral a bajas energías para $t \neq 0$. Recuadro derecho: densidad espectral a baja energía para $t_\ell = t = 0, 0,015, 0,02, 0,025$, y $0,03$.

3.4.1. Cruce desde el efecto Kondo ferromagnético al subapantallado ($N = 2$)

En la figura 3.2 graficamos la densidad espectral a temperatura cero del PC central $A_0(\omega, T = 0)$ en un dispositivo con $N = 2$, con los PCs idénticos ($U_\ell = U$, $\varepsilon_\ell = -U/2$) para diferentes valores del acoplamiento entre el PC central y los PCs laterales $t_\ell = t$. En este régimen de parámetros, hay un solo electrón promedio sobre cada PC. Para $t = 0$, obtenemos una resonancia de Kondo en el nivel de Fermi asociado con el apantallamiento del momento magnético del PC central. El ancho en la mitad del máximo de la resonancia es $\sim k_B T_K^0$ y su amplitud en el nivel de Fermi es $A_0(\omega = 0) = 2/\pi\Delta$ de acuerdo a las reglas de suma de Friedel [88] para el modelo de Anderson. Hay también dos picos en $\omega \simeq \varepsilon_0$, y $U + \varepsilon_0$ asociados a fluctuaciones de carga.

Cuando incluimos un pequeño acoplamiento t entre PCs, se genera una depresión en la densidad espectral que va hasta cero en el nivel de Fermi a temperatura cero. Esta depresión la podemos interpretar en términos de un hueco de Kondo formado como consecuencia del acoplamiento fuerte entre los PCs laterales y el PC central. Para $N = 2$, la depresión en la densidad espectral es contrario a lo que uno espera de la teoría de líquido de Fermi y el teorema de Luttinger [89], el cual, como vimos en el capítulo anterior, predice que para este sistema dentro del límite del ancho de banda, la densidad espectral depende de la ocupación total del sistema (ver ecuación 2.9). Cuando la ocupación promedio del PC central es 1 y la de los laterales es impar,

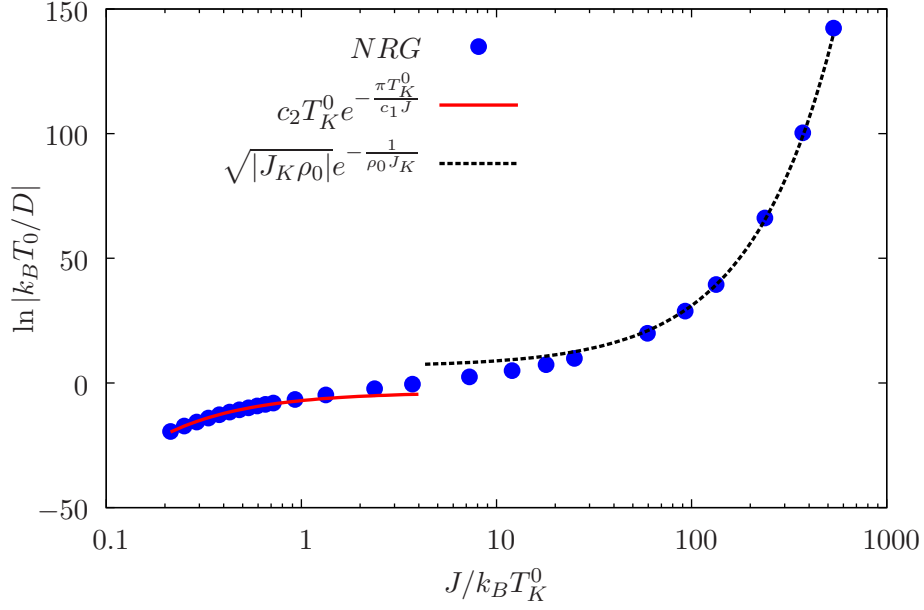


Figura 3.3: Comportamiento de la escala de baja energía $k_B T_0$ como una función del acoplamiento antiferromagnético entre el PC central y los laterales $J = 4t^2/U$ para un sistema con dos PCs laterales. Los otros parámetros son como la figura 3.2. Las líneas representan el comportamiento de la temperatura de Kondo en los dos regímenes correlacionados. La línea entrecortada es la escala de Kondo para un modelo ferromagnético, y la línea sólida es un ajuste usando la fórmula para la segunda temperatura de Kondo (ver ecuación 3.28) con los parámetros ajustados $c_1 = 0,9$, $c_2 = 3,8$.

la densidad espectral debería ir a cero, y para cuando la ocupación en los PCs laterales es par, la densidad espectral debería ir como $2/\pi\Delta$. Para $t > 1$ la densidad espectral de la figura 3.2 claramente no satisface la ecuación 2.9 ya que la densidad espectral es cero a pesar que la ocupación total en los PCs laterales es par. Esto indica que la densidad espectral se comporta como un no líquido de Fermi (NLF) y la integral de Luttinger no es cero [90]. En el recuadro izquierdo de la figura 3.2 se presenta $[A_0(\omega)]^{-1/2}$ como una función del $\ln(\omega)$, la cual tiene un comportamiento lineal a bajas energías consistente con un comportamiento singular de la forma

$$A_0(\omega \rightarrow 0) \simeq \frac{b}{\ln^2(|\omega|/k_B T_0)}, \quad (3.29)$$

como es esperado para modelos de Kondo ferromagnético y subapantallado [24, 69]. La amplitud de la depresión aumenta cuando incrementa t (ver recuadro derecho de la figura 3.2) y la resonancia de Kondo desaparece. Para t suficientemente grande el efecto Kondo asociado con el apantallamiento del PC central no se desarrolla y el sistema se encuentra en un régimen de Kondo ferromagnético. El comportamiento de la escala de baja energía $k_B T_0$ como una función de $J = 4t^2/U$ da cuenta del cruce entre el efecto Kondo subapantallado en dos etapas y el efecto Kondo ferromagnético para $J \sim k_B T_K^0$. Ajustando los valores de b y T_0 de la ecuación 3.29 por medio de los datos numéricos cuando $\omega \rightarrow 0$ de la figura 3.2, obtenemos T_0 como función de J , la cual la graficamos

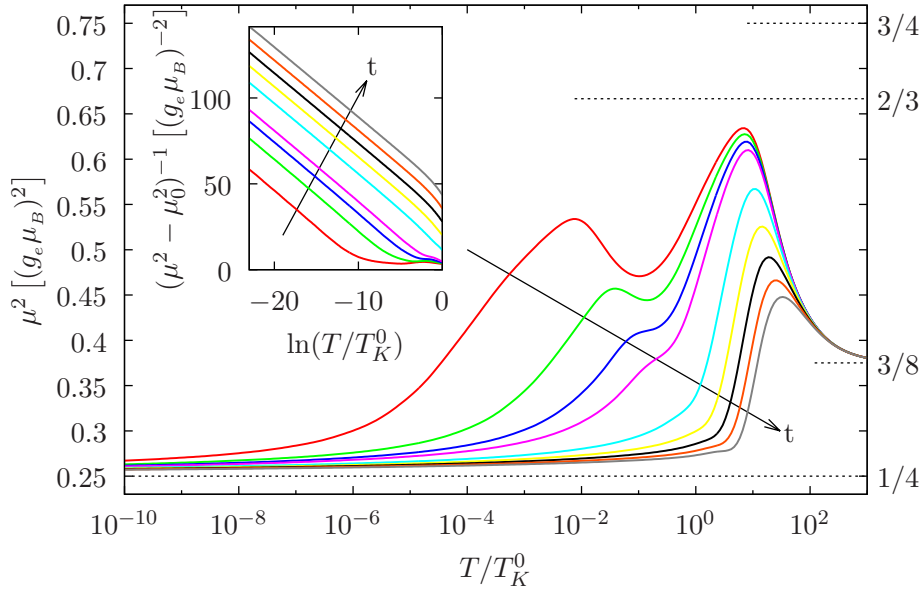


Figura 3.4: Momento magnético al cuadrado de un dispositivo de tres PCs como una función de la temperatura para diferentes valores del acoplamiento t entre el PC central y los laterales. Todos los parámetros son iguales a la figura 3.2, excepto para la curva $t = 0$ la cual no se muestra en esta figura. En el régimen del efecto Kondo subapantallado ($4t^2/U \ll k_B T_K^0$) se visualizan dos picos, mientras que en el régimen del efecto Kondo ferromagnético ($4t^2/U \gg k_B T_K^0$) hay un solo pico. Los valores esperados de μ^2 en cuatro casos límites (ver texto) están indicados en el eje derecho. En todo el rango de valores de t , el comportamiento a baja energía es logarítmico como mostramos en el recuadro.

en la figura 3.3. La dependencia de T_0 con J para $J \ll k_B T_K^0$ es consistente con el régimen de Kondo subapantallado $T_0 \sim T_K^*$ (ver ecuación 3.28). Para $J \gg k_B T_K^0$, la escala de temperatura T_0 es consistente con un régimen de Kondo ferromagnético con un acoplamiento J_K dado por la ecuación 3.10.

Los regímenes del efecto Kondo ferromagnético y subapantallado también se pueden identificar a través de la contribución a la susceptibilidad magnética χ por la temperatura, o el momento magnético al cuadrado μ^2 del arreglo de los PCs como una función de la temperatura. En la figura 3.4 dibujamos μ^2 como una función de la temperatura. En el régimen de alta temperatura ($k_B T \gg U, t, \Delta$), todos los estados del arreglo de los PCs son igualmente probables, lo cual conduce a $\mu^2 \sim 3/8$, donde cada PC contribuye con $\sim 1/8$ al momento magnético. Para $J \ll k_B T_K^0$, $\mu^2(T)$ tiene dos picos en función de la temperatura. El pico de alta temperatura en $T \sim U/k_B$ está asociado con la formación de un momento magnético de espín 1/2 sobre cada uno de los PCs, el cual para tres PCs aislados conducirían a un incremento de μ^2 de 3/4. El apantallamiento Kondo del momento magnético del PC central hace que μ^2 decrezca cuando la temperatura disminuye, el cual para cuando $J \rightarrow 0$ llegaría a un valor constante de 1/2 asociado con los dos momentos magnéticos desacoplados restantes sobre los PCs laterales. El pico a baja temperatura en μ^2 es debido al acoplamiento de los momentos magnéticos (a través del PC central) para formar un estado triplete con espín 1 (el

momento magnético que está asociado a un espín 1 es $2/3$). A más bajas temperaturas, el triplete de espín es parcialmente apantallado por las cuasipartículas de Kondo del PC central, conduciendo a un momento magnético residual $\mu_0^2 = 1/4$ cuando $T \rightarrow 0$, debido a un espín $1/2$ asintóticamente libre.

Cuando incrementamos J (debido al incrementar t), decrece la amplitud de los dos picos en μ^2 , y para $J \geq k_B T_K^0$ el pico a baja temperatura desaparece. En el último régimen, los momentos magnéticos de los PCs se acoplan para formar un espín $1/2$ a una temperatura de $T \sim J/k_B$, y los dos procesos de apantallamiento en el régimen de $J \ll k_B T_K^0$ no toman lugar. El espín $1/2$, el cual está acoplado ferromagnéticamente a los electrodos, se desacopla asintóticamente a medida que la temperatura disminuye [91], conduciendo a un momento magnético $\mu_0^2 = 1/4$ a temperatura cero.

En todo el rango explorado de valores de $t \neq 0$, el momento magnético a bajas temperaturas tiene un comportamiento singular de la forma

$$\mu^2 \sim \mu_0^2 \left(1 - \frac{1}{\ln(T/\tilde{T}_0)} \right), \quad (3.30)$$

como era de esperarse de las soluciones de las funciones de prueba de Bethe de los modelos de Kondo ferromagnético y subapantallado [92–94]. Esto lo mostramos en el recuadro de la figura 3.4 graficando $(\mu^2 - \mu_0^2)^{-1}$ en función de $\ln(T)$. Ajustando los datos para μ^2 con la expresión de la ecuación 3.30, encontramos que $\mu_0^2 \simeq 1/4$ y una escala de temperatura $\tilde{T}_0 \sim T_0$.

3.4.2. Dependencia de las propiedades a baja energía con el número de PCs laterales

Para reducir el costo computacional de los cálculos numéricos, en lo que sigue consideraremos un acoplamiento débil entre el PC central y los laterales donde desacoplamos los grados de libertad del estado vacío y doblemente ocupado en los PCs laterales, y así describiremos el acoplamiento entre PCs por medio de la ecuación 3.5. Por simplicidad, también enfocaremos nuestro análisis para el caso donde hay simetría electrón-hueco y $J_\ell = J$. También hemos chequeado numéricamente que nuestras conclusiones se mantienen para un amplio rango de parámetros donde estas condiciones no son satisfechas, rompiendo la simetría electrón-hueco y la simetría de los acoplamientos de intercambio.

El análisis de la sección previa se puede extender para cualquier número de PCs laterales. Como presentamos en la sección 3.3.3, para un acoplamiento débil del PC central con los electrodos $k_B T_K^0 \ll J$, el hamiltoniano a baja energía del sistema es un modelo de Kondo ferromagnético para un espín $L = (N - 1)/2$, lo cual no es cierto para la situación opuesta $J \ll k_B T_K^0$. En este último caso, cuando la temperatura

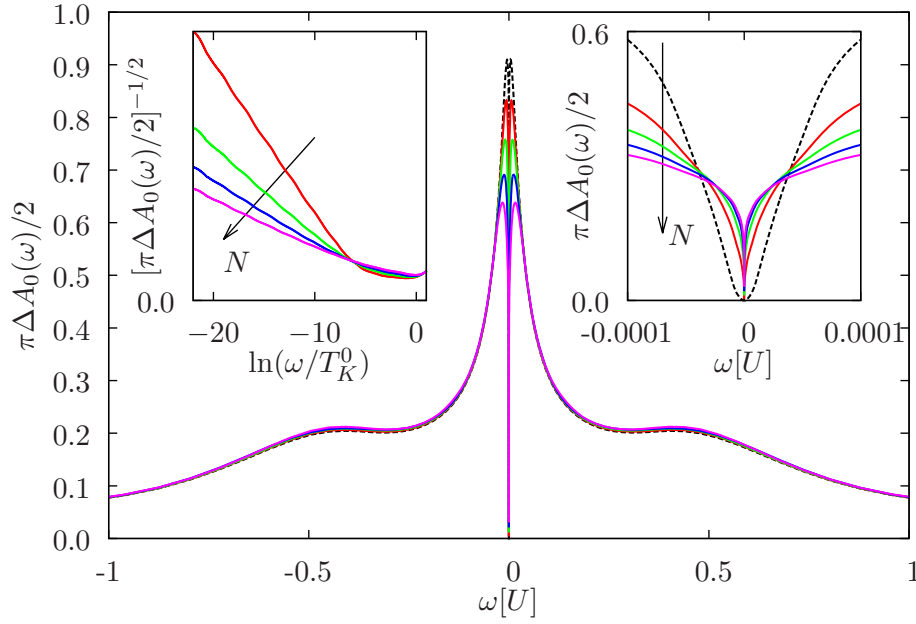


Figura 3.5: Densidad espectral del PC central $A_0(\omega)$ para un dispositivo con $N = 1, 2, 3, 4$, y 5 PCs laterales. Los dispositivos están en el régimen de Kondo de dos etapas $J = 0,004D$. Los otros parámetros son $U_0 = 0,4D$, $\varepsilon_0 = -0,2D$, y $\Delta = 0,04\pi D$. Recuadro izquierdo: gráfica de $A_0(\omega)^{-1/2}$ como función de $\ln(\omega)$ para visualizar mejor el comportamiento singular de la densidad espectral a bajas energías para $N > 1$. Recuadro derecho: ampliación de la densidad espectral a baja energía.

disminuye por debajo de T_K^0 , el momento magnético del PC central se apantalla, y a más bajas temperaturas ($T < J/k_B$) se forma un momento magnético $S = N/2$ en los PCs laterales, el cual es parcialmente apantallado debajo de una temperatura característica $\sim T_K^* \ll T_K^0$.

En la figura 3.5 graficamos la densidad espectral del PC central para sistemas que tienen hasta cinco PCs laterales. Los sistemas están en el régimen de Kondo en dos etapas, y $A_0(\omega)$ presenta las mismas características cualitativas para todos los valores de N . Hay dos picos de transferencia de carga posicionados en $\omega = \varepsilon_0, U + \varepsilon_0$ y un pico central de ancho $k_B T_K^0$ con una depresión en el nivel de Fermi de ancho $\sim k_B T_K^*$. Debido a la simetría electrón-hueco, la densidad espectral presenta un hueco en el nivel de Fermi, lo cual contradice lo esperado de la teoría de líquido de Fermi visto en la sección 2.4 para N par. Además el estado base para cualquier $N > 1$ no es un líquido de Fermi. El recuadro derecho de la figura 3.5 presenta que el comportamiento cuadrático esperado para un líquido de Fermi sólo se presenta para cuando $N = 1$. Para valores más grandes de N la densidad espectral se atenúa logarítmicamente de la forma de la ecuación 3.29, lo cual es confirmado al graficar $A_0(\omega)^{-1/2}$ como una función de $\ln(\omega)$ (ver recuadro izquierdo de la figura 3.5).

En la figura 3.6 graficamos la densidad espectral en el régimen de Kondo ferromagnético para un sistema que tiene hasta cinco PCs laterales. Aquí no hay resonancia de Kondo, pero hay una supresión de la densidad espectral a bajas energías. Para $\omega \rightarrow 0$,

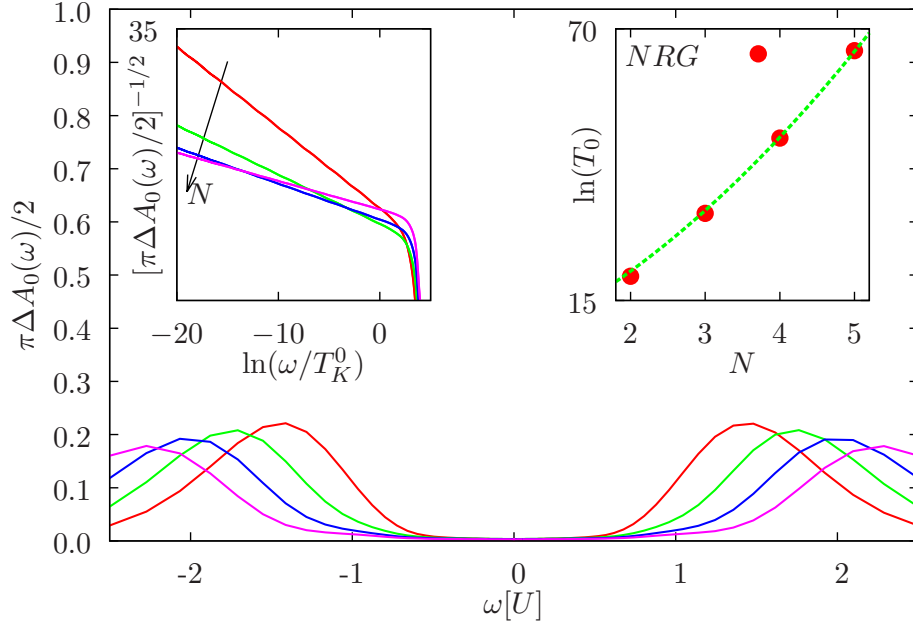


Figura 3.6: Como la figura 3.5 para dispositivos con $N = 2, 3, 4$, y 5 PCs laterales en el régimen de Kondo ferromagnético $J = 0,4D$. Recuadro izquierdo: gráfica de $A_0(\omega)^{-1/2}$ como función de $\ln(\omega)$ para visualizar mejor el comportamiento singular de la densidad espectral a bajas energías para $N > 1$. Recuadro derecho: dependencia en N de la escala de baja energía $k_B T_0$. Datos numéricos (puntos rojos rellenos) y la teoría (línea verde entrecortada).

se obtiene un comportamiento logarítmico (ver recuadro izquierdo de la figura 3.6) con una escala característica T_0 que es presentada en el recuadro izquierdo de la figura. T_0 presenta un comportamiento como $T_0 \sim D/k_B \sqrt{|\rho_0 J_K|} \exp(-1/\rho_0 J_K)$, donde J_K está dado por la ecuación 3.10, la cual graficamos en el recuadro derecho de la figura 3.6 en función de N como una línea entrecortada.

Las propiedades termodinámicas a baja energía presentan un comportamiento diferente como función de la temperatura en el régimen de Kondo en dos etapas y ferromagnético. La figura 3.7 presenta el momento magnético al cuadrado $\mu^2(T)$ del arreglo de los PCs como una función de la temperatura. También presentamos, como una referencia, los valores de $\mu^2(T)$ para los PCs desacoplados de los electrodos ($V = 0$). Como es de esperarse, tanto en el régimen de Kondo subapantallado y ferromagnético, los límites de bajas y altas temperaturas coinciden con los resultados del arreglo de los PCs aislados. En el límite en que $T \rightarrow 0$ en ambos regímenes el arreglo de los PCs tienen un momento magnético igual a $\mu_0^2 = \mu^2(T = 0) = L(L + 1)/3 = (N^2 - 1)/12$ como era de esperarse para un espín $L = (N - 1)/2$ ferromagnéticamente acoplado a los electrodos y para un espín $S = N/2$ subapantallado por las cuasipartículas del PC central. En el límite opuesto, $k_B T \gg V, J_\ell, U_0$ el arreglo de PCs se desacopla efectivamente de los electrodos y entre ellos mismos, de tal forma que hay una contribución al momento magnético de $N/4$ de los PCs laterales y $1/8$ del PC central conduciendo a un $\mu^2(T \rightarrow \infty) = (2N + 1)/8$. En ambos regímenes y a bajas temperaturas, μ^2 tiene un comportamiento logarítmico como se describe en la ecuación 3.30 con $\mu_0^2 \simeq (N^2 - 1)/12$

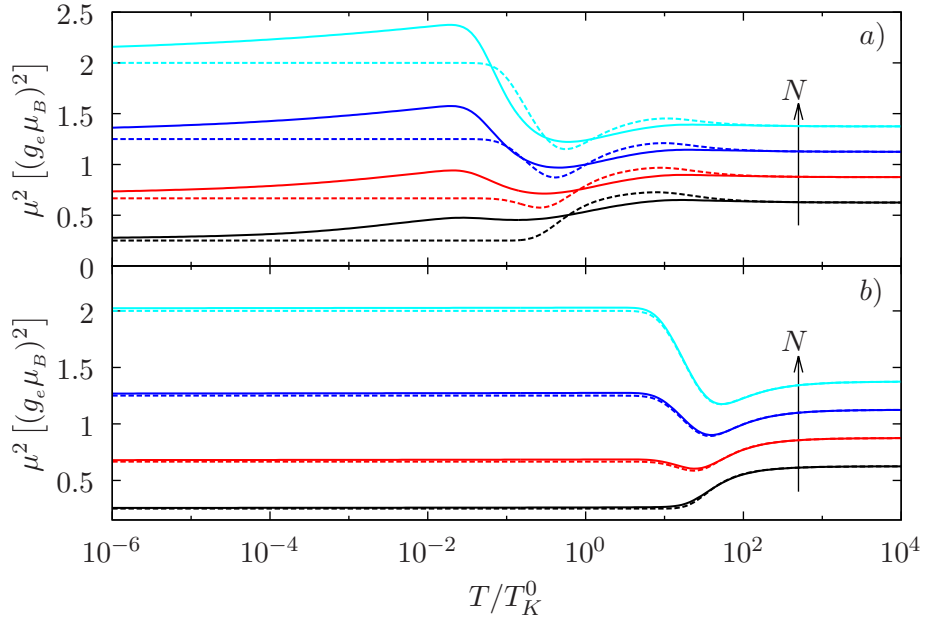


Figura 3.7: Momento magnético al cuadrado del arreglo de PCs para dispositivos con $N = 2, 3, 4$, y 5 PCs laterales. a) Régimen de Kondo en dos etapas ($J = 0,004D$). b) Régimen de Kondo ferromagnético ($J = 0,4D$). Los otros parámetros son como en la figura 3.5. Las líneas entrecortadas corresponden a un momento magnético al cuadrado para el arreglo de los PCs aislados ($V = 0$).

y $\tilde{T}_0 \sim T_0$.

En el régimen de Kondo ferromagnético, μ^2 tiene mínimas diferencias con los resultados de los PCs aislados. El acoplamiento a los electrodos produce una pequeña desviación que se atenúa logarítmicamente cuando la temperatura disminuye, y el arreglo de PCs se desacopla de forma efectiva de los electrodos. Sin embargo, en el régimen de Kondo subapantallado, el comportamiento de $\mu^2(T)$ es más complejo ya que aparecen los dos procesos de apantallamiento. Para $k_B T \leq U_0$ se forma un momento magnético en el PC central conduciendo a un incremento en μ^2 , el cual a más bajas temperaturas es apantallado por los electrones de conducción. Para energías térmicas más bajas que J , los espines de los PCs laterales forman un momento magnético asociado con un espín $S = N/2$ conduciendo a un pico en μ^2 de amplitud $\sim N(N+1)/12$ para $k_B T \sim J$. A más bajas temperaturas, se apantalla parcialmente el momento magnético conduciendo a una reducción logarítmica de μ^2 .

Capítulo 4

Filtro de espín y poder termoeléctrico en dispositivos de múltiples puntos cuánticos

4.1. Introducción

La espintrónica [95, 96] es la rama de la física que se encarga de aprovechar los grados de libertad del espín electrónico para aplicaciones en la transmisión y almacenamiento de la información, y operaciones computacionales cuánticas y clásicas. La principal ventaja de usar el espín electrónico es su baja disipación y la gran velocidad con que se pueden manipular sus grados de libertad para alguna operación [97]. Un paso clave hacia la implementación de dispositivos espintrónicos, es la habilidad de generar e inyectar corrientes de espín en materiales semiconductores [95, 96, 98, 99]. Una corriente de espín se puede inyectar a través de contactos ferromagnéticos o directamente en el material no magnético al aplicar un campo magnético externo.

Ha habido muchas propuestas para generar corrientes de polarización de espín usando PCs basados en heteroestructuras semiconductoras. Estas propuestas generalmente involucran pequeños PCs donde un solo nivel electrónico es relevante para las propiedades de transporte a bajas energías. En el régimen donde el nivel está ocupado con un solo electrón, un campo magnético puede polarizar el espín del electrón produciendo una transmitancia a través de él, que depende de la proyección del espín. Sin embargo, para obtener una gran polarización de espín en la corriente, se necesitan grandes campos magnéticos y una posición precisa del nivel de energía. La energía asociada con separación Zeeman necesita ser del orden de la hibridación y el nivel del PC debe estar cerca a la resonancia con el nivel de Fermi de los electrodos. Otras propuestas basadas en dispositivos de múltiples PCs usan efectos de interferencia para generar corrientes de polarización de espín, aplicando un campo magnético externo tal que se produce

una interferencia destructiva para en una de las componentes de espín y conduce a la anulación de la transmitancia [100–102].

Medidas del poder termoeléctrico en junturas moleculares [103] y la observación del efecto Seebeck de espín en conductores magnéticos [104] generaron numerosos estudios sobre la generación térmica de corriente de carga y espín en dispositivos nanoscópicos [29, 105–113]. El efecto Seebeck de espín se podría usar para generar una corriente de espín pura en dispositivos moleculares o de PCs, por ejemplo sin que tenga una corriente de carga asociada [112]. Ya hace varios años se sabía que un pico agudo en la densidad de estados cerca al nivel de Fermi podría conducir a un mejoramiento del poder termoeléctrico [114]. El desfasaje del pico de Abrikosov-Suhl en PCs del nivel de Fermi es mucho menor a la energía de Kondo ($\sim k_B T_K$), el cual se traduce en una pequeña asimetría electrón-hueco y así a una pequeña respuesta termoeléctrica a bajas temperaturas [108]. Otras variedades del efecto Kondo con impurezas de más alta simetría, como el caso de SU(4), el cual se puede observar en nanotubos de carbono, tienen una resonancia de Abrikosov-Suhl cuyo desfasaje del nivel de Fermi es orden de la energía de Kondo produciendo una gran respuesta termoeléctrica de carga [113, 115]. Sin embargo, para obtener una gran respuesta termoeléctrica de espín en estos sistemas Kondo, se debe obtener un desdoblamiento Zeeman más grande que la energía de Kondo.

En dispositivos donde un espín se desacopla asintóticamente del baño electrónico de los conductores a bajas temperaturas (como el efecto Kondo subapantallado y el ferromagnético), se ha evidenciado que este espín fácilmente se puede polarizar con un campo magnético externo, la cual presenta una gran respuesta en propiedades de magnetotransporte y efectos termoeléctricos de espín [29, 83, 116].

En este capítulo estudiamos las propiedades termoeléctricas del dispositivo descrito en el capítulo 3, para $N = 2$, donde se puede obtener un efecto Kondo subapantallado de espín 1, o un efecto Kondo ferromagnético de espín $1/2$ [25–28, 85, 117], dependiendo de los parámetros. Demostramos que estos dispositivos se pueden utilizar como filtros de espín y generar térmicamente una corriente polarizada en espín. También encontramos que en el régimen de Kondo ferromagnético, las propiedades singulares aparecen a una escala de energía mucho más grande que en el régimen de Kondo subapantallado, haciendo del primero más adecuado para la observación experimental de estos efectos.

Los siguientes resultados los publicamos en [118].

4.2. Modelo

El hamiltoniano que gobierna este dispositivo es el mismo que la ecuación 3.1, sólo que en este caso hay que añadirle el término Zeeman que depende de la proyección de espín de los PCs $H_B = g\mu_B B \sum_{\ell=0}^2 S_z^\ell$, donde ℓ etiqueta el correspondiente PC.

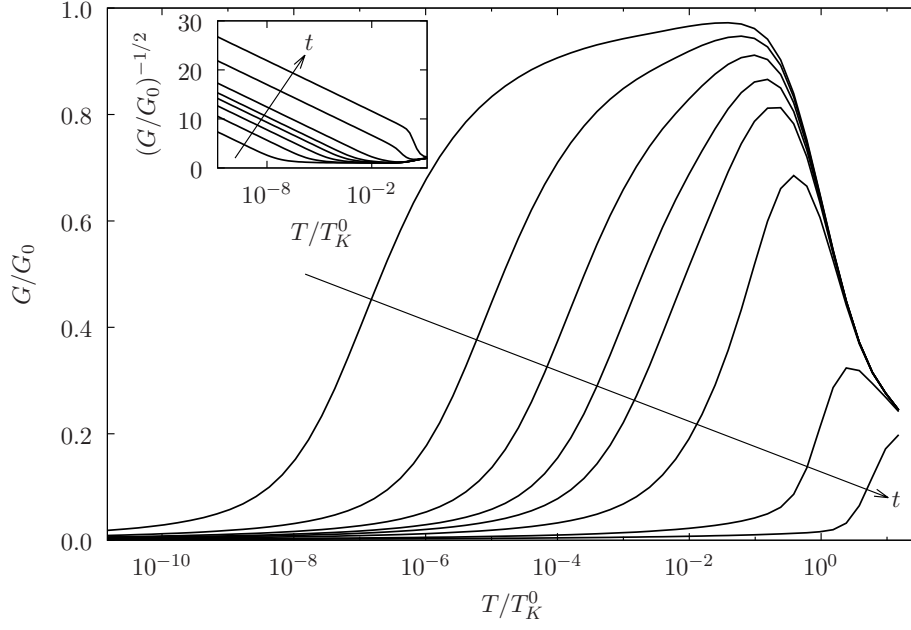


Figura 4.1: Conductancia como función de la temperatura para diferentes valores del acoplamiento túnel t . t/D toma los valores 0,012, 0,014, 0,016, 0,018, 0,02, 0,025, 0,05 y 0,1. Los otros parámetros son $U = 0,4D$, $V = 0,2D$ y $\epsilon_\ell = -U/2$. Recuadro: figura de $G^{-1/2}$ como función de $\ln(k_B T/T_K^0)$ para una mejor observación del comportamiento singular de la conductancia a bajas energías para $t \neq 0$.

4.3. Propiedades de transporte

Las propiedades de transporte y las fórmulas que las gobiernan están descritas en la sección 1.5.

4.3.1. Conductancia

Primero analizamos el comportamiento de la conductancia como una función de la temperatura para diferentes valores del acoplamiento entre PCs t . El sistema presenta, como una función de t , un cruce entre el régimen de Kondo ferromagnético, para valores grandes de t , a un régimen de Kondo en dos etapas para valores pequeños de t . En la figura 4.1 graficamos la conductancia a través del dispositivo de tres PCs en una situación en la que hay simetría electrón-hueco ($\epsilon_\ell = -U/2$) como una función de la temperatura para diferentes valores del acoplamiento túnel t . Para valores pequeños de t y a medida en que la temperatura disminuye, evidenciamos un aumento en la conductancia hasta alcanzar el valor de $G \sim G_0 = 2e^2/h$ para $T \leq T_K^0$, donde recordamos que T_K^0 es la temperatura de Kondo para el PC central. A temperaturas por debajo de una temperatura característica T_0 , se forma el efecto Kondo subapantallado y la conductancia decrece de nuevo a $G \sim 0$ para $T \ll T_0$. Cuando t incrementa, T_0 también lo hace y la meseta de alta conductancia desaparece. Para t suficientemente grande, la meseta no se evidencia pero la conductancia disminuye monótonamente. En este caso el sistema se encuentra dominado por la física de Kondo ferromagnético. En

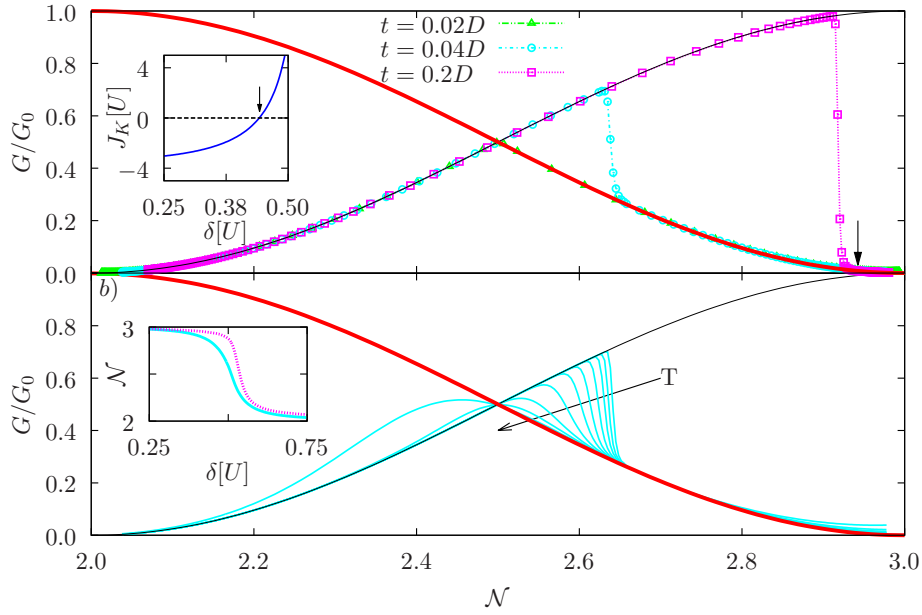


Figura 4.2: Conductancia G en función de la ocupación total \mathcal{N} de los PCs. a) Conductancia para diferentes acoplamientos t . Recuadro: acoplamiento Kondo como una función de δ para $t = 0.2D$. Las flechas indican el valor de $\delta = \delta^* \simeq 0.44U$ donde J_K es cero. b) Conductancia para $t = 0.04D$ a diferentes temperaturas. $k_B T$ toma los valores desde $10^{-13}D$ a $10^{-4}D$ en pasos de 1 en el exponente. Recuadro: \mathcal{N} como función de δ para $t = 0.04D$ (línea sólida) y $t = 0.2D$ (línea entrecortada). En a) y b) graficamos la conductancia esperada a temperatura cero para un líquido de Fermi singular $G_0 \sin^2(\pi\mathcal{N}/2 - \pi/2)$ (línea gruesa roja) y un líquido de Fermi regular $G_0 \sin^2(\pi\mathcal{N}/2)$ (línea delgada negra).

todo el rango de valores de t que se estudiaron, la conductancia a baja temperatura se comporta de forma singular como

$$G(T \rightarrow 0) \simeq G(T = 0) + \frac{b_G}{\ln^2(T/T_0)} \quad (4.1)$$

donde $k_B T_0$ es mucho más grande que D en el régimen de Kondo ferromagnético, y mucho más pequeño que D en el régimen de Kondo subapantallado (ver la figura 3.29 del capítulo anterior). Para los parámetros de la figura 4.1, $G(T = 0) = 0$, mientras que si se supone que el estado base es un líquido de Fermi, esperaríamos que $G(T = 0) = G_0$ ya que la ocupación promedio por espín es $\mathcal{N}_\sigma = 3/2$ (ver ecuación 2.11 del capítulo 2). Para sistemas con más PCs acoplados lateralmente obtenemos un comportamiento cualitativamente similar (ver sección 3.4.2).

En la figura 4.2 graficamos la conductancia como una función de la ocupación total \mathcal{N} , en el arreglo de PCs, la cual se cambia al desfasar la energía de uno de los PCs laterales por δ ($\varepsilon_0 = \varepsilon_1 = -U/2$ y $\varepsilon_2 = -U/2 + \delta$). Para $\mathcal{N} = 3$ el sistema está en el régimen de líquido de Fermi singular y así la conductancia va a cero. Cuando reducimos \mathcal{N} , la conductancia sigue el comportamiento que se esperaría para un líquido de Fermi

con una carga efectiva por espín en el arreglo de PCs reducida por $1/2$:

$$G(T \rightarrow 0) = G_0 \sum_{\sigma} \sin^2[(\mathcal{N}_{\sigma} - 1/2)\pi]. \quad (4.2)$$

Esto lo podemos entender, debido al desacoplamiento a bajas energías de un espín $1/2$ con el reservorio, la carga efectiva en el arreglo de los PCs se reduce. Para valores de t tales que en $\delta = 0$ ($\mathcal{N} = 3$) el sistema está en el régimen de Kondo ferromagnético, la conductancia a temperatura cero presenta una discontinuidad como función de \mathcal{N} . Calculamos numericamente el acoplamiento Kondo entre el espín del arreglo de PCs y el reservorio, y notamos que hay un cambio de signo de J_K en el valor de δ [ver recuadro de la figura 4.2a)], cerca donde se observa el salto en la conductancia. El recuadro de la figura 4.2a) muestra que el cambio en el signo de J_K para $t = 0,2D$ toma lugar en $\delta = \delta^* \simeq 0,44U$ el cual corresponde a una ocupación total de $\mathcal{N} = 2,942$ [ver recuadro de la figura 4.2b)] marcada por la flecha en la figura 4.2a). Como J_K decrece en valor absoluto, la temperatura de Kondo va a cero con un comportamiento singular esencial y se obtiene una transición Kosterlitz-Thouless para $J_K = 0$ donde el sistema cambia de comportarse como un líquido de Fermi singular a un líquido de Fermi regular. Esto cambia el comportamiento de la conductancia a temperatura cero el cual lo podemos describir por medio de la ecuación 2.11 para $J_K > 0$ y por la ecuación 4.2 para $J_K < 0$. Cerca a la transición, la temperatura necesita ser muy baja (más baja que T_0) para que la conductancia logre su valor de temperatura cero. A temperatura finita, la discontinuidad en $G(\mathcal{N})$ se redondea como podemos ver en la figura 4.2b), aunque hay una fuerte dependencia en el voltaje de la conductancia cerca a la transición. Para valores más bajos de t que analizamos, el sistema está en el régimen de Kondo subapantallado, la transición ocurre en $\mathcal{N} \simeq 2,5$ y no observamos un salto en la conductancia.

4.3.2. Poder termoeléctrico

En la figura 4.3 graficamos un mapa de la intensidad del coeficiente Seebeck de carga S_c como una función de la temperatura y el desfasaje de energía δ para un sistema que en $\delta = 0$ está en el régimen de Kondo ferromagnético ($t = 0,2D$). En la situación de simetría electrón-hueco ($\delta = 0$), los electrones y huecos contribuyen lo mismo a el efecto Seebeck pero con signos opuestos conduciendo a un coeficiente Seebeck nulo en todo el rango de temperaturas. Para $\delta \neq 0$, se rompe la simetría electrón-hueco el cual conduce a un coeficiente Seebeck de carga finito y que tiene un pico como función de la temperatura en $T \sim 0,1\Delta$. Para $\delta \sim U/2$ donde la ocupación del arreglo de PCs cambia entre ~ 3 y ~ 2 , hay un cambio en el signo de S_c y se evidencia un rasgo agudo en S_c incluso a las más bajas temperaturas que pudimos estudiar. Para valores

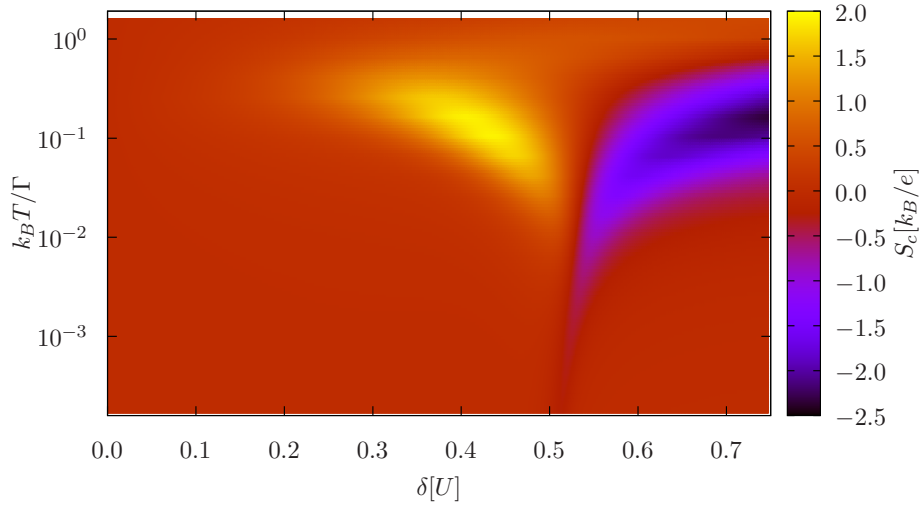


Figura 4.3: Coeficiente Seebeck de carga S_c en el régimen de Kondo ferromagnético ($t = 0,2D$) para $B = 0$. Hay un cambio de signo de S_c cerca de $\delta \sim U/2$ donde la ocupación total del arreglo de PCs cambia entre ~ 3 y ~ 2 . Los otros parámetros son como en la figura 4.1.

negativos de δ , se invierte el signo de S_c como $S_c(-\delta) = -S_c(\delta)$ debido a la simetría electrón-hueco.

Una expansión de Sommerfeld a bajas temperaturas para la ecuación 1.12 conduce a

$$S_\sigma(T) = -\frac{k_B}{|e|} \frac{\pi^2}{3} k_B T \frac{1}{A_\sigma(\omega = 0, T)} \left. \frac{\partial A_\sigma(\omega, T)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0}, \quad (4.3)$$

y así, para un líquido de Fermi, esperamos que haya una disminución lineal en T del coeficiente Seebeck cuando $T \rightarrow 0$. El comportamiento de la densidad espectral en el régimen de líquido de Fermi singular, ya la estudiamos en el capítulo anterior, la cual va como la ecuación 3.29, y la ecuación 4.3 no se puede aplicar a este sistema. El coeficiente Seebeck de carga tiende a cero a bajas temperaturas pero más lento que lineal en T debido a las correcciones logarítmicas. Esto lo observamos en la figura 4.4, donde la conductancia y el número de Lorenz también presentan una dependencia logarítmica con la temperatura a bajas temperaturas. Un campo magnético externo conduce al sistema desde un régimen de líquido de Fermi singular a uno regular permitiendo que la ecuación 4.3 se pueda aplicar, y así S_c tenga un comportamiento lineal con T .

4.4. Coeficiente Seebeck de espín y corriente de polarización de espín

En la ausencia de un campo magnético externo el sistema preserva la simetría de espín, $S_\uparrow \equiv S_\downarrow$, y el coeficiente Seebeck de espín S_s es cero (ver ecuación 1.14). En la situación cuando el sistema tiene simetría electrón-hueco ($\delta = 0$), $A_\uparrow(\omega) = A_\downarrow(-\omega)$ [ver la figura 4.5a)] y $S_\uparrow = -S_\downarrow$ los cuales conduce a un S_s finito bajo la aplicación de un

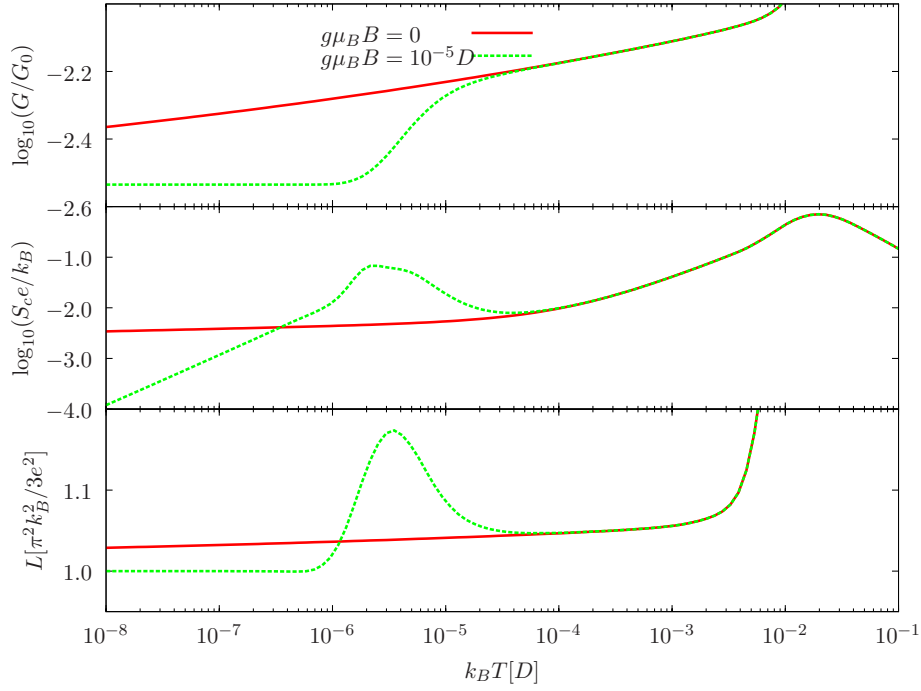


Figura 4.4: Paneles de arriba a bajo: Conductancia, coeficiente Seebeck de carga, y número de Lorenz, como una función de la temperatura para un sistema en el régimen de Kondo ferromagnético $t = 0,2D$ y $\delta = 0,23U$. Los otros parámetros son como en la figura 4.1.

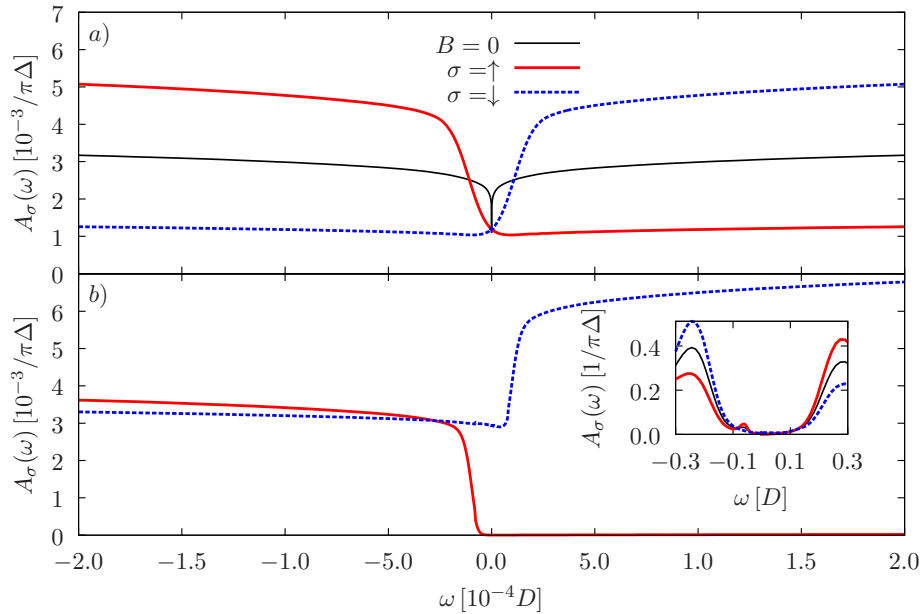


Figura 4.5: Densidad espectral del PC central a bajas energías para $k_B T = 0,3\mu_B B = 3 \times 10^{-6}D$ en el régimen de Kondo ferromagnético ($t = 0,2D$) y $\delta = 0$. Para $B = 0$ la densidad espectral tiene simetría electrón-hueco y presenta un comportamiento singular a bajas energías. b) lo mismo como en a) pero para $\delta = 0,23U$ y $k_B T = 10^{-6}D$. Recuadro: Densidad espectral en un amplio rango de energías que incluye los picos de Hubbard en $\omega \sim \pm U/2$ y presenta la polarización de espín bajo la aplicación de un campo magnético.

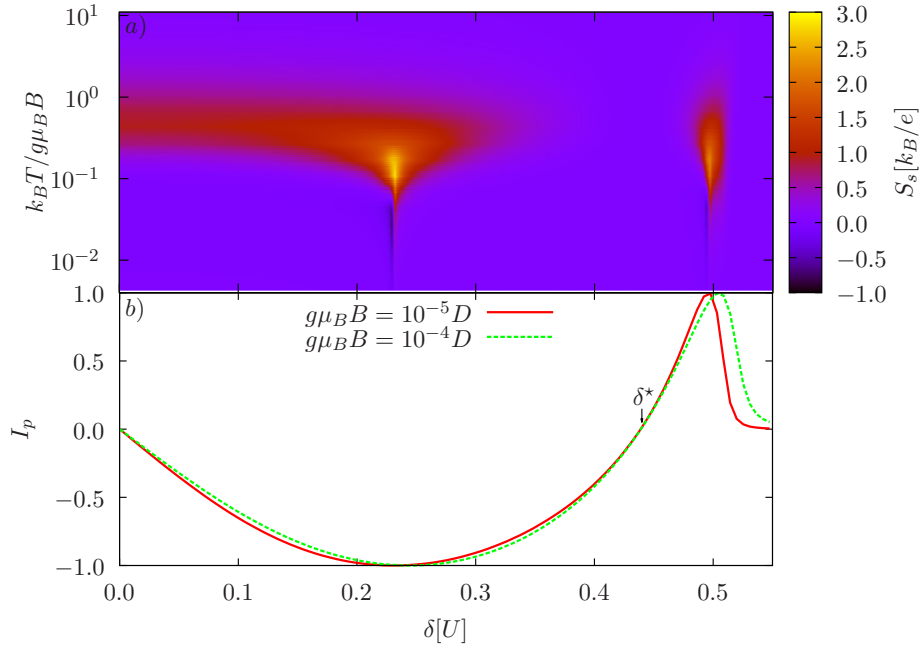


Figura 4.6: a) Coeficiente Seebeck de espín en el régimen de Kondo ferromagnético ($t = 0,2D$) y $g\mu_B B = 10^{-5}D$. Hay dos picos asociados con un máximo de S_\uparrow en $\delta = 0,23U$ y un mínimo de S_\downarrow en $\delta \sim U/2$. b) Corriente de polarización a temperatura cero I_p como una función de δ . Hay un rango amplio de valores de δ alrededor de $\delta \sim 0,23U$ donde la corriente es $\sim 100\%$ polarizada.

campo magnético finito B . En la figura 4.6a) graficamos el coeficiente Seebeck de espín como una función de la temperatura y el desfase de energía δ . Para $\delta < \delta^*$ el sistema está en el régimen de líquido de Fermi singular y el espín se puede polarizar fácilmente a bajas temperaturas por la aplicación de un campo magnético. Esto conduce a una fuerte asimetría electrón-hueco para $A_\sigma(\omega)$ y a un gran $S_s \sim k_B/|e|$ para $k_B T \sim g\mu_B B$. Para $k_B T \ll g\mu_B B$, la teoría de líquido de Fermi se puede aplicar y S_s es proporcional a la temperatura como se expresa en la ecuación 4.3.

Para ambos $\delta \sim 0,23U$ y $\delta \sim U/2$, S_s presenta un gran pico y un rasgo agudo con un cambio de signo a bajas temperaturas. Estas características están asociadas con la anulación de G_\uparrow y G_\downarrow , respectivamente, lo cual conduce a una corriente de polarización de espín de $\sim 100\%$. Esto lo podemos observar en la figura 4.6b) el cual graficamos el factor de corriente de polarización $I_P = \frac{G_\uparrow - G_\downarrow}{G_\uparrow + G_\downarrow}$ como una función de δ . $|I_P|$ obtiene sus valores máximos donde el coeficiente Seebeck de espín es máximo. Para $k_B T \ll g\mu_B B$ el sistema se encuentra en el régimen de líquido de Fermi y así es válida la ecuación 2.11 para la conductancia. La ocupación total y la magnetización cambian cuando se varía la energía de desfase δ y el campo magnético, y tenemos que $\mathcal{N} = \mathcal{N}_\uparrow + \mathcal{N}_\downarrow = 3 - \Delta\mathcal{N}$ y $M = \mathcal{N}_\uparrow - \mathcal{N}_\downarrow = 1 - \Delta M$, donde $0 \leq \Delta\mathcal{N} \leq 1$ para todo $\delta \geq 0$, y $\Delta M \geq 0$ para $0 \leq \delta \leq \delta^*$ y $\Delta M < 0$ para $\delta > \delta^*$. De la ocupación total y la magnetización deducimos

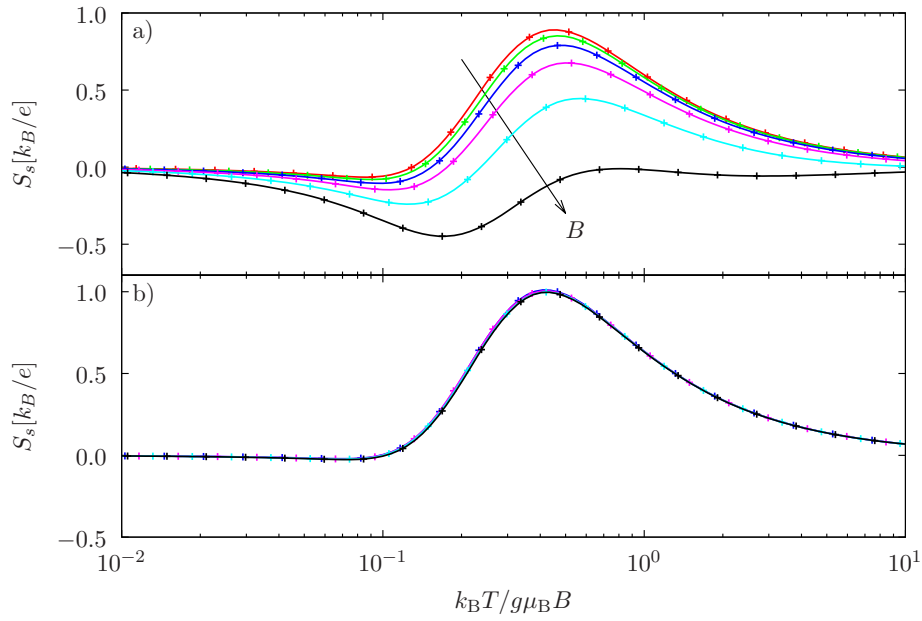


Figura 4.7: Coeficiente Seebeck de espín como función de la temperatura y el campo magnético en $\delta = 0$ para a) $t = 0,02D$ y b) $t = 0,2D$. El campo magnético varía desde $10^{-11}D$ a $10^{-6}D$ en pasos de 1 en el exponente.

que la ocupación por espín es

$$\mathcal{N}_{\uparrow} = 2 + (\Delta M - \Delta \mathcal{N})/2, \quad (4.4)$$

$$\mathcal{N}_{\downarrow} = 1 - (\Delta M + \Delta \mathcal{N})/2. \quad (4.5)$$

Para $\delta = 0,23U$, $\Delta M = \Delta \mathcal{N}$ y \mathcal{N}_{\uparrow} es un número entero que resulta en $G_{\uparrow} = 0$ (ver la ecuación 2.11), mientras que para $\delta \sim U/2$, $\Delta M = -\Delta \mathcal{N}$, \mathcal{N}_{\downarrow} es un número entero y $G_{\downarrow} = 0$. La anulación de la conductancia para una de las proyecciones de espín a bajas temperaturas, está asociada con la anulación de la densidad espectral en el nivel de Fermi (ver la figura 4.5). Esto se puede ver al hacer una expansión de Sommerfeld a bajas temperaturas de la ecuación 1.9 para la conductancia $G_{\sigma} = e^2 \Delta / 2\hbar \times A_{\sigma}(\epsilon_F = 0)$. Cabe mencionar que según la ecuación 4.3, S_{σ} es grande cuando $A_{\sigma}(0)$ es pequeño, lo que explicaría los picos de S_s en la figura 4.6, y el cambio de signo de S_s a bajas temperaturas en $\delta = 0,23U$ y en $\delta \sim U/2$ están asociados a un cambio de signo de las derivadas $\partial A_{\uparrow}(\omega, T)/\partial \omega$ y $\partial A_{\downarrow}(\omega, T)/\partial \omega$ respectivamente.

En la figura 4.7 graficamos el coeficiente Seebeck de espín como una función de la temperatura escaleado por el campo magnético aplicado para una situación en que se tiene simetría electrón-hueco ($\delta = 0$). Encontramos un gran pico en S_s para $k_B T \sim g \mu_B B$ que pierde fuerza cuando el campo magnético incrementa en el régimen de Kondo subapantallado [ver la figura 4.7a)], y mantiene su magnitud para el régimen de Kondo ferromagnético [ver la figura 4.7b)]. Esto es debido al hecho de que en el régimen de Kondo subapantallado la escala de energía $k_B T_0$, que determina el comienzo del

comportamiento singular, es mucho más pequeño que el ancho de banda (ver capítulo anterior) y un campo magnético externo puede llevar al sistema fuera del régimen de Kondo ferromagnético. Sin embargo, en el régimen de Kondo ferromagnético la escala de energía $k_B T_0$ es mucho más grande que el ancho de banda y el comienzo del comportamiento singular ocurre a escalas de energía más grandes ($\sim U$).

Capítulo 5

Dinámica de muchos cuerpos en el decaimiento de un trión y de excitones de diferentes cargas en un punto cuántico

5.1. Introducción

La manipulación óptica de PCs semiconductores ha sido un tema de gran interés gracias a su potencial uso en el control del espín electrónico para procesamiento de información cuántica [119–121] y espintrónica [122–124]. También han sido propuestos diferentes medios ópticos de manipulación [124] y detección [123] del espín. La investigación en esta área se centraliza esencialmente en las transiciones ópticas que involucran excitones o triones. Estos estados son respectivamente uno y dos electrones en la banda de conducción del PC y un hueco en la banda de valencia (ver sección 1.6), y pueden ser ajustados por medio de un voltaje de compuerta V_g [4, 119–121, 125–128].

Un aspecto ubicuo de la fotoluminiscencia por el decaimiento de estas excitaciones de varias cargas [4, 127–130] o por la absorción de la luz creándolas [130–132], es la manifestación de la hibridación de los orbitales del PC con un continuo de estados extendidos. Como ya vimos antes, podemos describir el sistema por medio del modelo de impureza de Anderson, y en el límite donde hay un número impar de electrones en el PC y una hibridación pequeña, este modelo se reduce al modelo de Kondo (ver sección 1.3), donde el espín localizado tiene una interacción de intercambio con los espines de los electrones en el mar de Fermi, el cual conlleva a un estado base singlete de muchos cuerpos.

El espectro de fotoluminiscencia que resulta del decaimiento de un trión (X^-) [4, 128] y el excitón neutro (X^0) [4] ha sido medido como una función de V_g . La línea

(para un V_g dado) de fotoluminiscencia del X^- es una consecuencia de una transición óptica a un estado con sólo un electrón promedio en el PC. Como una consecuencia de la hibridación del PC con el mar de Fermi, la fotoluminiscencia se ensancha cerca a los límites de estabilidad del trión, esto es asimétrico y hay un corrimiento no monótono al azul. Para el decaimiento del X^0 , se presentan efectos similares y no triviales de las correlaciones y la hibridación en el estado inicial [4]. Usando aproximaciones variacionales [133] y de una partícula [128], se pudieron explicar cualitativamente las características principales observadas para el decaimiento del trión, y otros esquemas aproximados fueron usados tanto para el decaimiento del X^- como para la del X^0 [4], pero aún falta un cálculo totalmente fiable. En contraste, la creación del X^0 [131] y el X^- [132] por absorción óptica fueron calculados usando NRG, y en el caso del X^- se encontró un acuerdo notable con los experimentos.

Debido a que estas transiciones ocurren repentinamente, están relacionadas a otro campo de gran interés en los años recientes, como lo es la dinámica de sistemas altamente correlacionados (en particular del efecto Kondo) después de un enfriamiento cuántico [131, 132, 134–138]. Adicionalmente, el espectro debería presentar, a bajas temperaturas, un comportamiento de ley de potencias en el umbral de la fotoluminiscencia característico de las singularidades de borde de rayos X [130–132, 139]. Esto es debido a la catástrofe de ortogonalidad de Anderson [32], la cual es otra piedra angular de la física de muchos cuerpos, y requiere técnicas sofisticadas para su tratamiento.

En este capítulo, calculamos la fotoluminiscencia en todo el rango de voltajes de compuerta entre la región de estabilidad del X^- y del X^0 , usando NRG dentro de la aproximación de matriz densidad completa. Estos resultados proveen una explicación de recientes experimentos de Kleemans et al [4], y presenta un comportamiento diferente del espectro de fotoluminiscencia bajo un campo magnético aplicado. Antes de adentrarnos a los resultados, en la próxima subsección describiremos el montaje y resultados experimentales.

Todos los resultados numéricos los publicamos en [140].

5.1.1. Montaje y resultados experimentales

El montaje experimental de Kleemans et al [4] se muestra en la figura 5.1, y consiste de una estructura crecida epitaxialmente por haces moleculares, y tiene 15nm de espesor de un contacto inferior n-dopado que actúa como el gas de Fermi, el cual está separado de los PCs con una capa túnel de 16nm de GaAs. Sobre esta capa túnel se crece InAs que debido a la tensión superficial, forman islas y así los correspondientes PCs, cuyas energías de emisión están entre los 1.3 y 1.38eV. Los PCs son cubiertos por una capa de GaAs de 15nm, y encima de ésta se crece una super-red de AlAs/GaAs de 84nm, la cual actúa como una capa que bloquea el intercambio de electrones entre los PCs y el

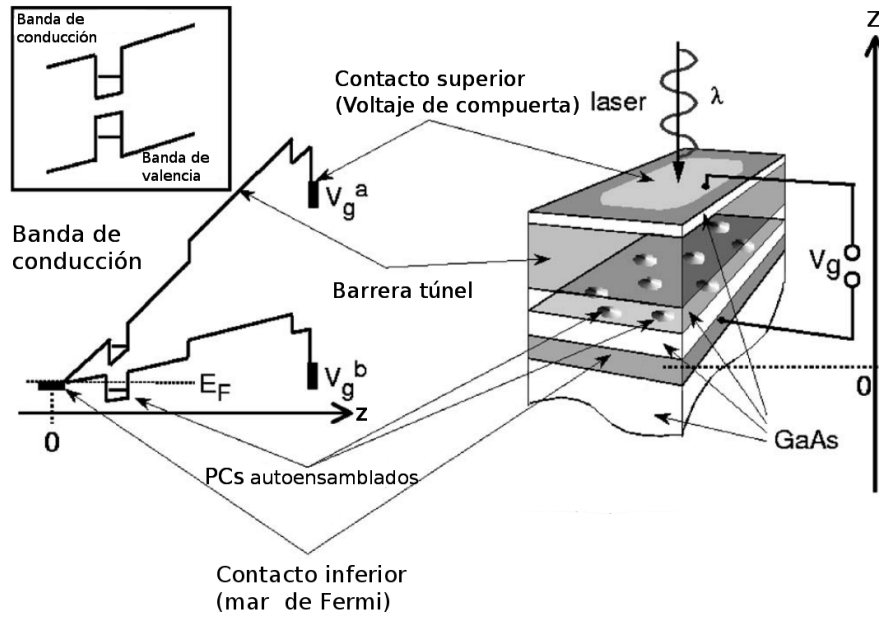


Figura 5.1: Esquema del montaje experimental para los resultados de Kleemans et al [4]. Figura sacada de [5]. Para detalles de la composición de las múltiples capas ver el texto. Un voltaje de compuerta V_g^a hace que el nivel de la banda de conducción del PC este vacío, mientras que uno V_g^b ponga este nivel ocupado con un solo electrón.

contacto superior, donde este último se creció con una capa de NiCr y donde se aplica el voltaje de compuerta V_g . Desde la parte superior de la muestra, se le inyecta radiación láser, y haciendo uso de un arreglo confocal, ellos midieron la fotoluminiscencia de los PCs individuales como función del voltaje de compuerta a una temperatura de 4.2K. La excitación láser fue provista por un diodo láser que emite a una longitud de onda de 635nm, y la fotoluminiscencia fue analizada con un sistema de detector espectrómetro con una resolución de $60\mu\text{eV}$.

En la figura 5.2 se muestra parte del espectro de fotoluminiscencia para un PC típico obtenida por Kleemans et al. Para voltajes negativos, ellos observan tres mesetas que corresponden a un excitón y a dos multi-excitones neutros (X^0 , $2X^0$ y $3X^0$), la cola larga que se junta con la meseta del excitón X^0 y que corresponde a la excitación de Mahan X_M^0 (recombinación de un hueco de la banda de valencia del PC con un electrón del mar de Fermi), la meseta del trión X^- , y la excitación X_f^0 . Esta figura muestra un ensanchamiento en los extremos de las mesetas del excitón X^0 y del trión, y un corrimiento al azul para el excitón y al rojo para el trión. En lo que sigue propondremos un modelo que logre explicar de forma cualitativa y en algunos casos cuantitativamente el espectro de la figura 5.2 (a excepción del excitón cargado positivamente X^+ y el tri-excitón $3X^0$).

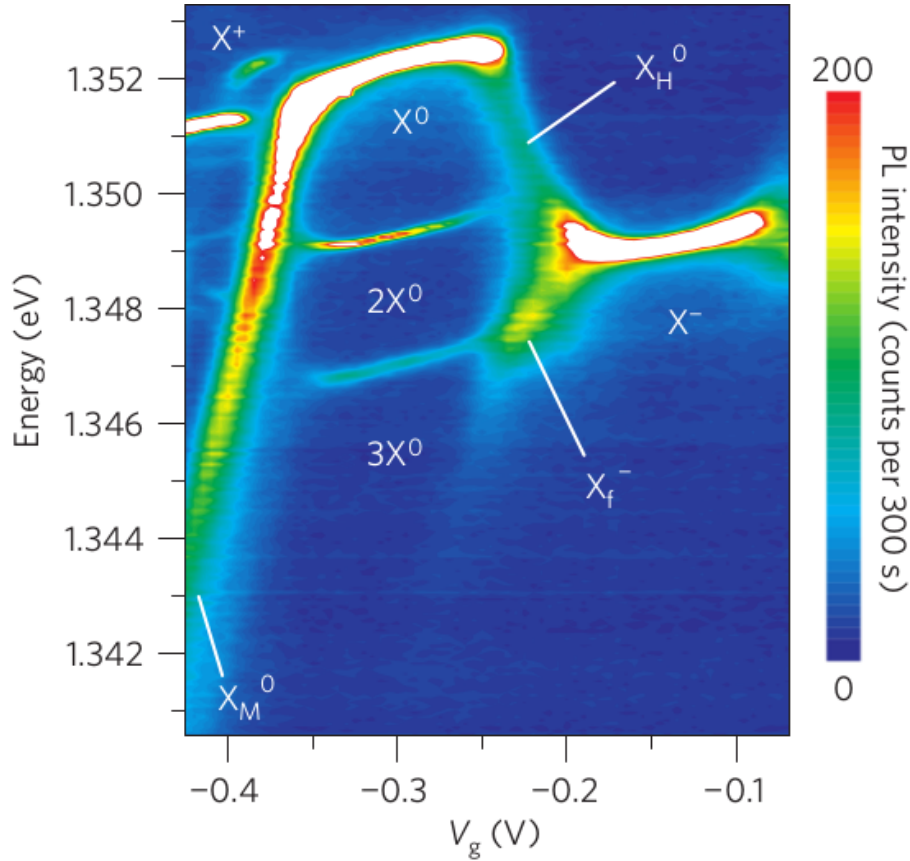


Figura 5.2: Medida experimental del espectro de fotoluminiscencia de un PC como función del voltaje de compuerta V_g , donde se muestra las diferentes excitaciones del sistema (ver texto). Figura sacada de Kleemans et al [4].

5.2. Modelo

Usando la regla de oro de Fermi, la intensidad de la fotoluminiscencia está dada por

$$I(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{if} w_i |\langle f | H_{LM} | i \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_f - E_i), \quad (5.1)$$

donde ω es la frecuencia de fotoluminiscencia, $|i\rangle$ es el estado inicial (por ejemplo X^- o X^0), $|f\rangle$ son los posibles estados finales, E_j es la energía del estado $|j\rangle$, $w_i = \exp(-k_B E_i)/Z$ es el peso de Boltzmann del estado inicial $|i\rangle$ y la parte relevante de la interacción de la luz con la materia se puede escribir como

$$H_{LM} = A(d_{\uparrow}^{\dagger} p_{3/2} + d_{\downarrow}^{\dagger} p_{-3/2}) + \text{h.c.}, \quad (5.2)$$

donde A es proporcional al vector potencial, d_{σ}^{\dagger} crea un electrón de espín $\sigma = \pm 1/2$ en la banda de conducción del PC, y p_j aniquila un electrón de valencia con momento angular de $3/2$ y proyección j en la dirección de crecimiento del semiconductor [119].

El hamiltoniano que gobierna el sistema es

$$\begin{aligned}
 H = & E_e n_d + U_{ee} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{k\sigma} (V_k d_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \text{h.c.}) \\
 & + \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + E_h n_h + U_{hh} n_{h3/2} n_{h-3/2} \\
 & - U_{eh} n_d n_h + U'_{ee} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} n_h.
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Aquí $h_j^{\dagger} \equiv p_j$ crea un hueco pesado en el PC, $n_d = n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow}$. Excepto para los últimos cuatro términos que tienen operadores de huecos, el hamiltoniano corresponde al del modelo de Anderson. Los dos primeros términos describen la energía del nivel y la repulsión de los electrones en el PC, el tercer término es la hibridación del mar de Fermi con el PC y el cuarto término describe la banda de conducción de los electrones del mar de Fermi. El quinto término es la energía del hueco en la banda de valencia con $n_h = n_{h3/2} + n_{h-3/2}$ y $n_{hm} = h_m^{\dagger} h_m$ es la ocupación del hueco con proyección de espín $m = \pm 3/2$, el sexto término es la repulsión entre huecos, el séptimo término es la atracción entre huecos de la banda de valencia y los electrones de la banda de conducción del PC, y el último término toma en cuenta el incremento de la repulsión entre electrones debido a la contracción de la función de onda después de la adición de los huecos. Este último mejora los resultados numéricos de acuerdo a lo que se ve en el experimento, para los valores de V_g para el trión y para el biexcitón $2X^0$. Contrario a aproximaciones previas, aquí consideramos la hibridación tanto para el estado inicial como para el final. La energías de sitio de los electrones del PC y el hueco cambian con el voltaje de compuerta como $E_e = E_e^0 - eV_g/\lambda$ y $E_h = E_h^0 + eV_g/\lambda$, respectivamente, donde λ es un parámetro que depende de la capacitancia entre el PC y el electrodo de compuerta. Para guiarse esquemáticamente como el voltaje de compuerta conduce al sistema a diferentes regímenes de excitación, ver la figura 1.4 del capítulo 1.

Los parámetros se pueden determinar experimentalmente [4, 128]. Por ejemplo, despreciando la hibridación V_k , la amplitud del rango de voltaje en la cual el espectro de fotoluminiscencia está dominada por el decaimiento del trión X^- es $V_{ee}^1 = \lambda U_{ee}/e$ [ver la figura 5.3a) que calculamos con el modelo molecular explicado más abajo]. De los datos de la referencia [4] tomamos $\lambda = 8$, $E_e^0 = -25$ meV, $E_h^0 = 1398,5$ meV, $U_{ee} = 13,93$ meV, $U'_{ee} = 3,52$ meV y $U_{eh} = 20,97$ meV. Suponemos que la hibridación $\Delta = \pi \sum_k |V_k|^2 \delta(\epsilon_F - \epsilon_k) = 1\text{meV}$ es independiente de la energía y que el ancho de banda es $2D = 100\Delta$ simétrica alrededor de la energía de Fermi ϵ_F .

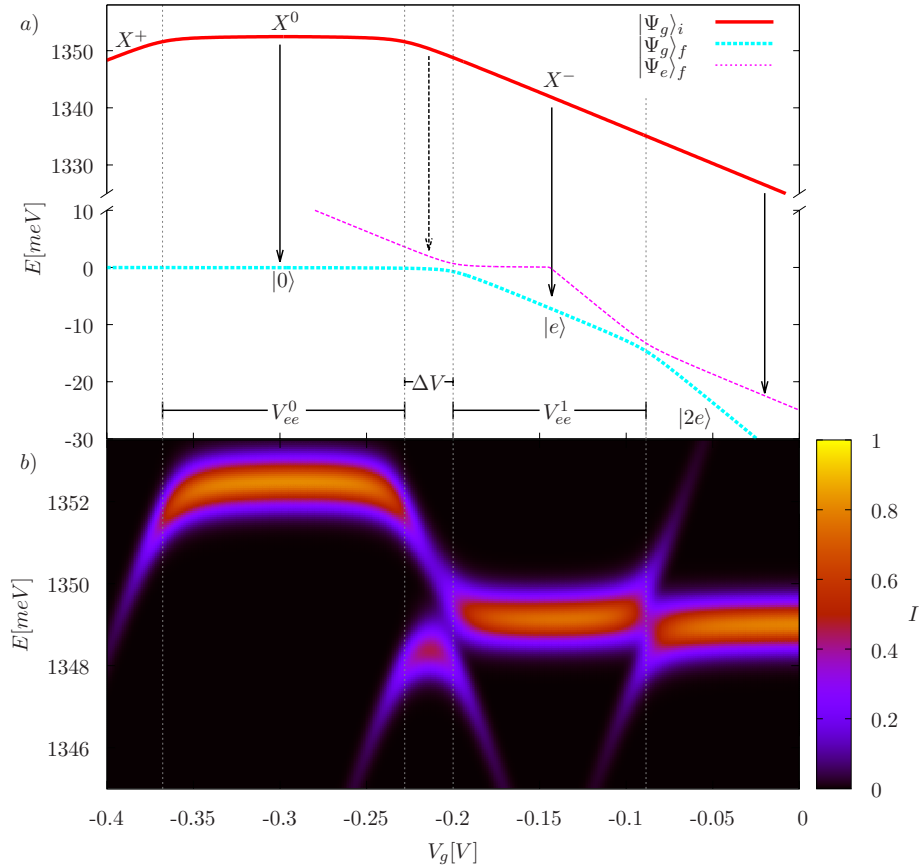


Figura 5.3: a) Niveles de energía más relevantes del modelo molecular y las posibles transiciones de fotoluminiscencia (indicadas con flechas). $|\Psi_g\rangle_i$ y $|\Psi_g\rangle_f$ son los estados base inicial y final, respectivamente. $|\Psi_e\rangle_f$ es un estado final excitado. Aquí $V_{ee}^0 = \lambda(U_{ee} + U'_{ee})/e$, $V_{ee}^1 = \lambda U_{ee}/e$ y $\Delta V = \lambda(U_{eh} - U_{ee} - U'_{ee})/e$. b) Energía de todas las posibles transiciones con un ensanchamiento gaussiano artificial. El elemento de matriz de la hibridación entre el nivel del PC y el nivel efectivo del mar de Fermi es $V = 1$ meV. Los parámetros son $T = 1,75K$, $E_e^0 = -25$ meV, $E_h^0 = 1398,5$ meV, $U_{hh} = U_{eh} = U_{ee} + 2U'_{ee} = 20,97$ meV, $U'_{ee} = 3,52$ meV y $\lambda = 8$.

5.3. Resultados

5.3.1. Modelo molecular

La evolución del pico de máxima fotoluminiscencia con el voltaje de compuerta lo podemos entender cualitativamente usando un modelo molecular en el cual el ancho de banda es reducido a cero ($D \rightarrow 0$). Así, se necesita considerar solamente un electrón en el mar de Fermi con energía igual a la energía de Fermi ϵ_F ¹. Los estados más relevantes de este modelo los graficamos en la figura 5.3a). El estado base inicial, antes de la emisión de luz, depende del voltaje V_g y está compuesto principalmente de sólo un hueco (X^+) en la banda de valencia del PC, o un excitón X^0 , o un trión X^- , que están conectados en regiones con una mezcla entre estados X^+ y X^0 , o X^0 y X^- debido a la hibridación entre el PC y el mar de Fermi. Los estados finales después de la emisión de

¹Este modelo molecular es similar al modelo de ancho de banda cero en la información suplementaria de la Ref. [4], sólo que incluimos todas las configuraciones de carga.

luz no tienen huecos en la banda de valencia y, de forma similar al estado inicial, están compuestos por los estados de cero electrones ($|0\rangle$), un electrón ($|e\rangle$) o dos electrones ($|2e\rangle$) en la banda de conducción del PC. Las flechas en la figura 5.3a) corresponden a las principales transiciones en cada régimen de voltaje. X_f^- corresponde a la transición indicada por la flecha con línea entrecortada, desde el trión a un estado excitado con una ocupación en el PC entre cero y uno. Las mesetas observadas las podemos entender en el límite de $V \rightarrow 0$. La recombinación del excitón $X^0 \rightarrow |0\rangle$ tiene una energía de emisión de $\hbar\omega = E_e^0 + E_h^0 - U_{eh}$ en el intervalo $E_e^0 - U_{eh} \leq eV_g/\lambda \leq E_e^0 - U_{eh} + U_{ee} + U'_{ee}$, el cual define la meseta para V_g chico. La meseta para V_g grande, con una energía de $\hbar\omega = E_e^0 + E_h^0 - 2U_{eh} + U_{ee}$, se deriva de la recombinación del trión $X^- \rightarrow |e\rangle$, en el rango $E_e^0 \leq eV_g/\lambda \leq E_e^0 + U_{ee}$, dejando solamente un estado ocupado en la banda de conducción del PC. El modelo molecular da cuenta de unas pocas transiciones, siendo el sistema real un sistema que comprende muchos cuerpos y por lo tanto aparece física de Kondo y la catástrofe de ortogonalidad de Anderson. No obstante, para darnos una idea, hemos ensanchado todas las posibles transiciones resultantes del modelo molecular con una función gaussiana de ancho artificial $\sim T$ como podemos ver en la figura 5.3b).

5.3.2. Cálculos NRG-FDM sin campo magnético

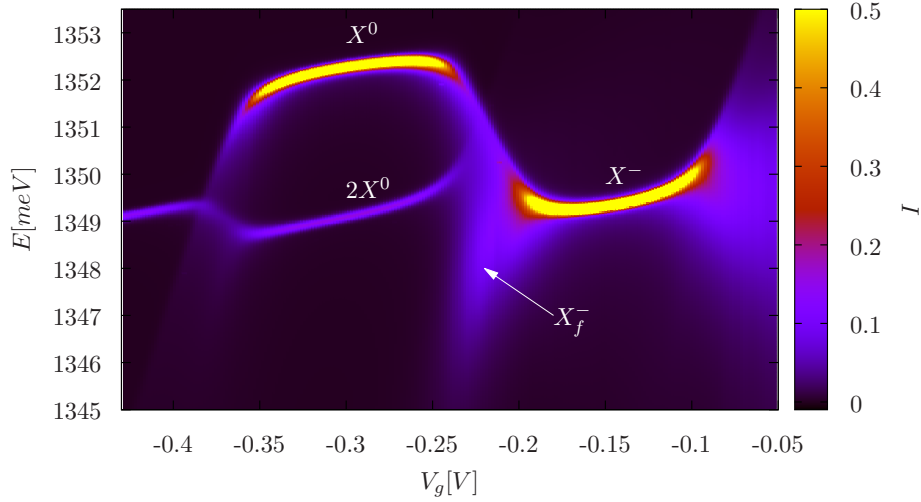


Figura 5.4: Espectro de fotoluminiscencia como una función del voltaje de compuerta V_g . La intensidad está normalizada por dos veces la intensidad máxima en $V_g = -0,35V$. $\Delta = 1$ meV, y los otros parámetros son los mismos de la figura 5.3.

Aquí usamos NRG dentro de la aproximación de matriz densidad completa, y los resultados los comparamos con los experimentos de Kleemans [4]. El código lo corrimos dos veces, uno con la presencia de uno o dos huecos en la banda de valencia del PC (estado inicial), y otro con un hueco menos (estado final). Calculamos la matriz densidad para los estados iniciales y los elementos de matriz que entran en la ecuación (5.2) [132, 139]. En la figura 5.4 graficamos los resultados del espectro de fotoluminiscencia

como una función del voltaje de compuerta V_g . Hay dos mesetas de alta intensidad que corresponden al decaimiento del excitón neutral X^0 (V_g bajo) y del trión X^- (V_g alto). Cerca del cruce entre ellos, las mesetas se curvan y la meseta de X^- se mezcla con otra línea de transición de más baja frecuencia e intensidad, la cual corresponde a la excitación X_f^- . Nuestros resultados van muy acorde con los experimentos de Kleemans [4] excepto por los excitones de Mahan con carga positiva, los cuales van más allá del modelo utilizado.

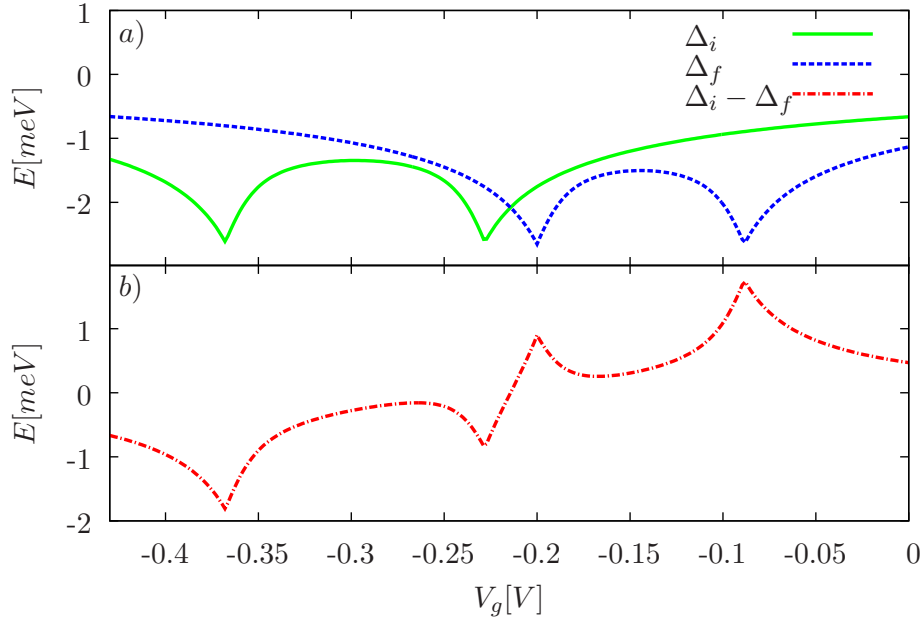


Figura 5.5: a) Línea sólida verde: ganancia de energía debido a la hibridación Δ_i del estado inicial antes de la fotoemisión. Línea entrecortada azul: ganancia de energía Δ_f para el estado final después de la fotoemisión. b) Cambio en la ganancia de energía del fotón emitido $\Delta_i - \Delta_f$ debido a la hibridación.

Debido a la hibridación, tanto la energía del estado inicial y final decrecen en una cantidad de $\sim \Delta$. Esta energía ganada, calculada con NRG-FDM, la graficamos en la figura 5.5 para los parámetros del experimento [4]. Como era de esperarse, la energía ganada es más grande cerca a las regiones de valencia intermedia [ver figura 5.5a)]. Por ejemplo, hay un mínimo en la energía del estado final en $V_g = \lambda E_e^0/e = -0,2V$ para el cual, la ocupación n_d de este estado está entre cero y uno. Este estado también tiene otro mínimo en $V_g = \lambda(E_e^0 + U_{ee})/e = -0,088V$ donde $n_d \approx 1,5$. También podemos notar que incluso en el régimen de Kondo $V_g \approx -0,144V$ para el cual $n_d \approx 1$, la ganancia de energía es del orden de Δ en contraste a lo esperado en aproximaciones simplificadas [4, 133]. El desfase en la frecuencia de fotoluminiscencia está dado por la diferencia entre la fase correspondiente para los estados final e inicial [ver figura 5.5b)]. Para $V_g \geq \lambda E_e^0/e$ (región del decaimiento del trión), el efecto de la hibridación es un corrimiento hacia el azul, el cual es más pronunciado en el régimen de valencia intermedia de los estados finales. De forma similar, en la región del decaimiento del

excitón, el efecto de la hibridación es un corrimiento hacia el rojo, más grande cerca a los límites de estabilidad del X^0 ya sea contra X^+ o X^- . Estos corrimientos explican rasgos característicos de la frecuencia de fotoluminiscencia como una función del voltaje de compuerta observados en los experimentos y reproducidos en la figura 5.4; en particular la curvatura hacia abajo en la región del excitón, y la curvatura hacia arriba en la región del trión. Podemos hacer un razonamiento similar para el decaimiento del biexcitón $2X^0$, el cual conduce al mismo comportamiento cualitativo al decaimiento del trión, y va muy acorde con los experimentos de Kleemans.

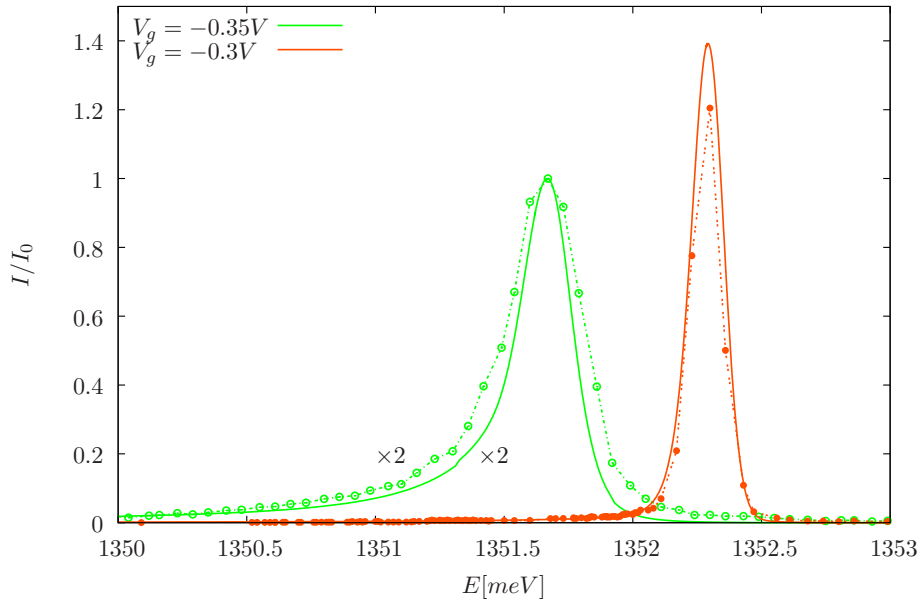


Figura 5.6: Resultados NRG de la intensidad de la fotoluminiscencia para la forma de línea cerca del comienzo de la meseta de X^0 (línea sólida verde) y en el centro de la meseta de X^0 (línea sólida naranja). Los círculos rellenos de color naranja y abiertos de color verde son los resultados digitalizados de Kleemans [4] para la forma de línea cerca al comienzo y en el centro de la meseta de X^0 , respectivamente. Las intensidades fueron divididas por dos veces el máximo de intensidad $I_0 = I(1351,6 \text{ meV})$ para $V_g = -0,35V$.

En la figura 5.6 graficamos dos formas de línea que corresponde a $V_g = -0,35V$ y $-0,3V$, y los respectivos resultados experimentales digitalizados de Kleemans. Hay una muy buena similitud entre ellas. La cola larga a bajas energías, da evidencia de las excitaciones producidas por el cambio repentino de la dinámica del sistema asociado con la catástrofe de ortogonalidad de Anderson. Para discutir este punto en más detalle, en la figura 5.7 graficamos la intensidad de fotoluminiscencia en escala logarítmica para temperaturas mucho más bajas que la de Kondo T_K y tres valores del voltaje de compuerta: $V_g = -0,144V$ que corresponde al régimen de Kondo para el estado final en el decaimiento del trión, $V_g = -0,214V$ en la región donde la frecuencia cambia fuertemente con el voltaje de compuerta, para la cual tanto el estado inicial como el final están en el régimen de valencia intermedia, y el último es en $V_g = -0,3$ que corresponde al régimen de Kondo para el estado inicial en el decaimiento del excitón. En el primer caso, cuando se disminuye la frecuencia, recobramos el mismo régimen

estudiado teóricamente para la absorción de la luz creando un excitón neutral [131]. A altas frecuencias, la física está dominada por el punto fijo de orbital libre del NRG, con una dependencia de $I(\omega') \sim \omega'^2$. Al disminuir la frecuencia, la forma funcional de la intensidad corresponde al punto fijo de momento local hasta que se logra la frecuencia de Kondo $k_B T_K / \hbar$. Para $\hbar\omega' < k_B T_K$, la física entra en el régimen de acoplamiento fuerte, y la dependencia en la intensidad es una ley de potencia $\omega'^{-\eta_\sigma}$ característica de la catástrofe de ortogonalidad de Anderson en un líquido de Fermi. El exponente está dado por [131]

$$\eta_\sigma = 1 - \sum_{\sigma'} \Delta n'_{\sigma'}(\sigma) \quad (5.4)$$

$$\Delta n'_{\sigma'}(\sigma) = (\delta_{\sigma\sigma'} - \Delta n_{\sigma'})^2 \quad (5.5)$$

donde $\Delta n_{\sigma'}$ es el cambio en la ocupación local de los electrones con proyección de espín σ' , entre las configuraciones final e inicial, y $\Delta n'_{\sigma'}(\sigma)$ es la carga desplazada de electrones con espín σ' que fluye desde el sitio de dispersión al infinito cuando $p_{\sigma 3}^\dagger d_\sigma |i\rangle$ cambia a $|f\rangle$. Cuando no hay campo magnético $\Delta n_\uparrow = \Delta n_\downarrow$. Este comportamiento divergente a bajas frecuencias termina en una frecuencia $k_B T / \hbar$ determinada por la temperatura. Para $V_g = -0,214V$, el comportamiento es similar, excepto por la ausencia del régimen del momento local y diferente exponente η_σ . Para $V_g = -0,3V$ (decaimiento del X^0), dentro de las excitaciones finales en la que el sistema puede llegar, no se encuentra el régimen de momento local, y la intensidad de la fotoluminiscencia es cuatro veces más pequeño en $\omega \sim k_B T_K / \hbar$ que para el decaimiento del trión. Como resultado de esto, se tiene una curvatura más suave, similar a la línea de absorción que lleva a la formación de un trión en la referencia [132].

De las ocupaciones de los diferentes estados, y usando la ecuación 5.4 obtenemos que $\eta_\sigma = 0,4987$ para $V_g = -0,144V$, $\eta_\sigma = 0,3571$ para $V_g = -0,214V$, y $\eta_\sigma = 0,4983$ para $V_g = -0,3$. Las curvas $\omega'^{-\eta_\sigma}$ también las graficamos en la figura 5.7 con la intensidad como el único parámetro de ajuste.

5.3.3. Cálculos NRG-FDM con campo magnético

Finalmente, analizamos el comportamiento del espectro de fotoluminiscencia bajo un campo magnético aplicado, el cual produce un desdoblamiento de los niveles del PC². Como se puede ver de nuestros resultados en la figura 5.8, el campo magnético produce un desdoblamiento de las mesetas de fotoluminiscencia en dos picos de diferente ancho. El ancho asimétrico de los picos de fotoluminiscencia se debe a la dependencia que tiene el exponente de la ley de potencias con el campo magnético (ver la figura 5.9) [131], mientras que el desdoblamiento es causado por los factores giromagnéticos para

²De la referencia [132] tomamos los factores giromagnéticos del hueco y el electrón como $g_h = 1,1$ y $g_e = -0,6$, respectivamente.

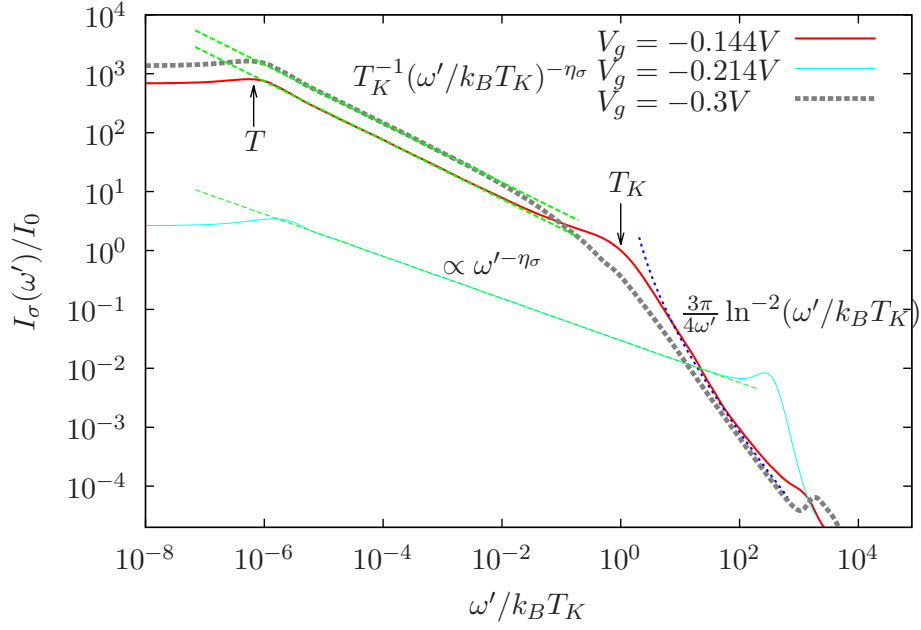


Figura 5.7: Intensidad de la fotoluminiscencia como una función de la frecuencia $\omega' = \omega_e^* - \omega$, donde ω_e^* es la frecuencia donde la Intensidad diverge, en una escala logarítmica para dos valores del voltaje de compuerta. La intensidad está normalizada por $I_0 = I(k_B T_K / \hbar)$ calculada para $V_g = -0,144V$.

electrones y huecos [132]. Las mesetas que involucran la recombinación de un espín up electrónico tienen una intensidad exponencialmente suprimida para el decaimiento del X_{\uparrow}^0 y del X_{\uparrow}^- a bajas temperaturas debido a la probabilidad reducida de encontrar un hueco con proyección de espín de alta energía en el estado base inicial. Para entender mejor esto, el desdoblamiento Zeeman para los electrones en la banda de conducción y para los huecos es:

$$E_{e\sigma} = E_e - \frac{1}{2}\sigma|g_e|\mu_B B, \quad (5.6)$$

$$E_{h\sigma} = E_h + \frac{1}{2}\sigma|g_h|\mu_B B, \quad (5.7)$$

donde $\sigma = 1$ para el espín electrónico up, y -1 para el espín down. De estas ecuaciones vemos que para la recombinación de un electrón con espín up, la energía asociada al hueco es grande y por lo tanto este estado inicial es suprimido por el factor de Boltzmann w_i de la ecuación 5.1. En el régimen del decaimiento del excitón, la meseta X_{\downarrow}^0 tiene muy poca intensidad con respecto a la meseta X_{\downarrow}^- ya que el estado inicial tiene un electrón con espín down que es de mayor energía que el up (ver ecuación 5.6), pero es más visible que en el caso del decaimiento del X_{\uparrow}^0 ya que $|g_e| < |g_h|$. Para el decaimiento del biexcitón los espines de los electrones y huecos están compensados en el estado base inicial, y claramente vemos tanto la meseta $2X_{\uparrow}^0$ como la meseta $2X_{\downarrow}^0$.

En la figura 5.9 graficamos la intensidad de fotoluminiscencia en escala logarítmica para temperaturas mucho más bajas que la de Kondo T_K , diferentes valores del campo magnético externo, y para cada proyección de espín en el régimen del decaimiento

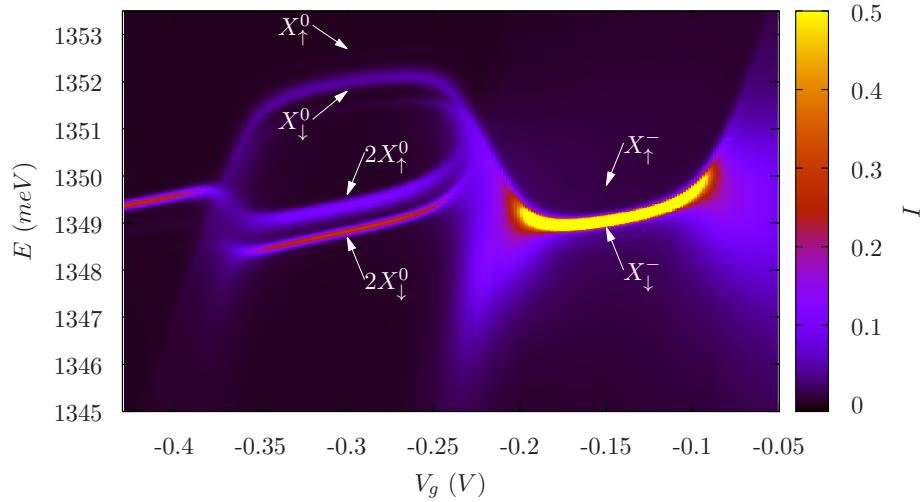


Figura 5.8: Intensidad de la fotoluminiscencia en presencia de un campo magnético externo que produce un desdoblamiento Zeeman $\mu_B B/2 = 0,57$ meV del nivel electrónico del PC y un desdoblamiento de $\sim 1,05$ meV para el nivel del hueco en $T = 1,75K$. La meseta donde el trión decae se desdobla en dos mesetas de intensidad similares y de diferentes anchos, mientras que en la meseta del decaimiento del excitón está dominada por una sola proyección de espín.

del excitón y del trión sin el factor de Boltzmann de los huecos. Aquí podemos ver que la ley de potencias cambia con el campo magnético. En el régimen de X^- (X^0) para la proyección de $\sigma = \uparrow$ el exponente $\eta_{\uparrow} \rightarrow -1$ ($\rightarrow 1$) cuando el campo magnético aumenta, mientras que para la proyección $\sigma = \downarrow$ el exponente $\eta_{\downarrow} \rightarrow 1$ ($\rightarrow -1$). Cuando $g_e \mu_B B < k_B T_K$ el valor del exponente varía muy poco ya que el sistema está en el régimen de Kondo (en el estado inicial para el excitón y en el final para el trión) y se necesita un campo del orden de esta temperatura para poder polarizar el espín y así evidenciar un cambio considerable en el exponente. Este comportamiento del exponente para $g_e \mu_B B > k_B T_K$ lo podemos explicar mediante las ecuaciones 5.4 y 5.5. Cuando $\eta_{\sigma} \rightarrow 1$, la catástrofe de ortogonalidad de Anderson está ausente ya que no hay carga desplazada después de pasar al estado final ($\Delta n'_{\downarrow} = 0$ en el decaimiento del trión y $\Delta n'_{\uparrow} = 0$ en la del excitón) y en consecuencia el espín del nivel electrónico del PC no necesita reacomodarse. Así, la forma de línea de la intensidad tiende a parecerse a una función delta de Dirac. Cuando $\eta_{\sigma} \rightarrow -1$ la catástrofe de ortogonalidad de Anderson es máxima, y así la carga desplazada para este espín es $\Delta n'_{\uparrow} = 1$ en el decaimiento del trión y $\Delta n'_{\downarrow} = 1$ en la del excitón (ver ecuaciones 5.4 y 5.5), de esta forma, el espín del electrón del nivel electrónico del PC tiene que hacer un giro a la proyección de espín contraria para lograr estar en su estado base. Para hacer este giro, debido a la hibridación, un electrón de espín \uparrow del mar de Fermi salta al nivel electrónico de espín \uparrow del PC (estado de más baja energía), mientras el espín \downarrow del PC (estado superior de energía) salta al mar de Fermi. La carga en el mar de Fermi se debe reacomodar para lograr estas transiciones ya que la energía del electrón que salta del mar de Fermi al PC difiere en energía (del orden del desdoblamiento Zeeman) del electrón que recibe del

PC. Es decir, la carga en el mar de Fermi se reacomoda para poder formar un hueco de energía $E_{e\downarrow}$ a partir del hueco de energía $E_{e\uparrow}$. Esto es así ya que los campos magnéticos que se estudiaron son menores a la energía del nivel electrónico del PC en ausencia de campo magnético.

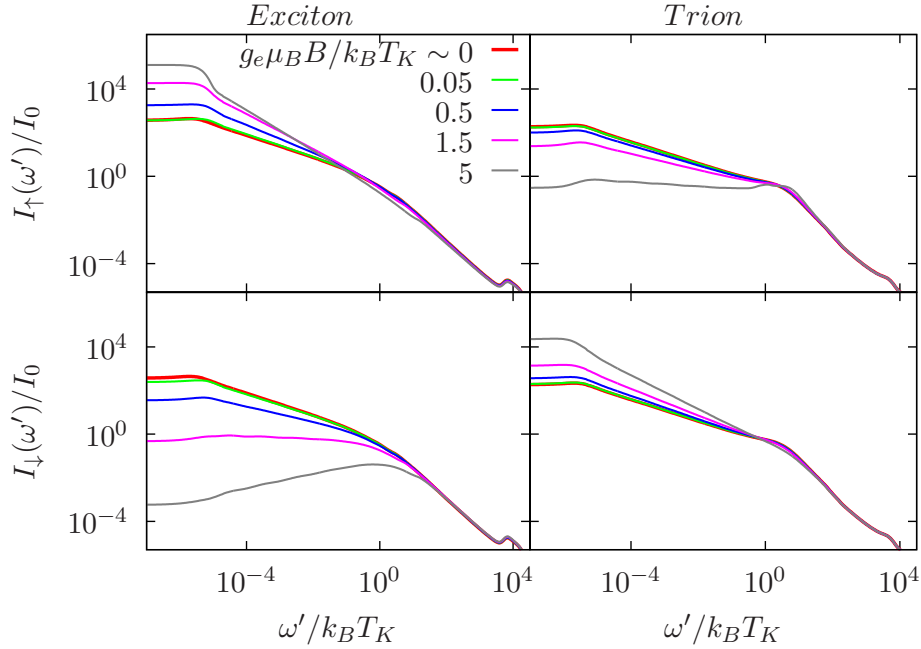


Figura 5.9: Intensidad de la fotoluminiscencia como una función de la frecuencia ω' , definida en la figura 5.7, en una escala logarítmica para diferentes valores del campo magnético. Los paneles del lado izquierdo están en el régimen del decaimiento del excitón ($V_g = -0,3V$) y los paneles del lado derecho están en el régimen del decaimiento del trión ($V_g = -0,144V$). Los otros parámetros son los mismos como en la figura 5.7. En esta figura no está incluida el factor de Boltzmann debido a los huecos, y en caso de ser incluido, la intensidad de los paneles asociados al decaimiento del espín up sería exponencialmente chica pero la dinámica electrónica sería la misma.

Capítulo 6

Conclusiones

6.1. Generales

- Logramos implementar el código de grupo de renormalización numérica de Wilson incluyendo mejoras como el truco z , implementación de una base completa NRG, y la extensión de la matriz densidad completa.
- Con el código NRG y sus mejoras se pudieron calcular diferentes propiedades para varios sistemas. Entre las propiedades calculadas están las termodinámicas, las termoeléctricas, las magnetoeléctricas, de transporte y las dinámicas.
- Con ayuda de cálculos analíticos y numéricos se pudo entender el comportamiento físico de diferentes arreglos de puntos cuánticos: entre ellos i) el sistema de dos PCs acoplados lateralmente donde en uno de ellos se tiene en cuenta su carácter multinivel, y estudiamos su influencia en las correlaciones de Kondo a baja energía; ii) PCs en una configuración de estrella donde dependiendo de los parámetros se puede obtener una física de Kondo ferromagnético o subapantallado. Debido a su gran sensibilidad de polarizarse un espín casi-libre con un campo magnético externo, se puede obtener un coeficiente Seebeck de espín grande junto con corrientes de polarización en espín.
- Finalmente se logró comprender, mediante cálculos numéricos con NRG, la física detrás de parte del espectro experimental de fotoluminiscencia de un PC, para diferentes regímenes de excitaciones. Aquí se evidencian efectos de electrones altamente correlacionados sobre la fotoluminiscencia, formas de líneas, corrimientos de estas debido a la hibridación y la física de este sistema en presencia de un campo magnético.

6.2. Capítulo 2

- Analizamos el transporte eléctrico a través de un dispositivo de dos puntos cuánticos acoplados lateralmente. Un PC pequeño (PC central) tiene un solo nivel relevante y tiene un acoplamiento túnel con dos electrodos, y con otro PC grande (PC lateral), donde este último no está acoplado directamente a los electrodos. Consideramos múltiples niveles en el PC lateral e interacciones coulombianas entre los electrones del DPC.
- Suponiendo un estado base de líquido de Fermi, obtenemos una relación exacta entre la conductancia a temperatura cero y la ocupación electrónica del DPC. Los términos de interacción adicionales en el hamiltoniano, como el acoplamiento de las reglas de Hund, pueden conducir a un estado base que no es un líquido de Fermi.
- Exploramos numéricamente la conductancia a través del sistema con los parámetros apropiados para describir dos situaciones experimentalmente relevantes: *i*) un sistema con espaciamiento grande entre niveles sobre el PC lateral y *ii*) un sistema que comprende hasta tres niveles cuasidegenerados en el PC lateral. En el último caso consideramos que los niveles cuasidegenerados fueron los más relevantes en el cálculo de las propiedades de transporte eléctrico, como es de esperarse si el resto de niveles en el PC lateral tienen energías mucho más grandes. En el primer caso, el cual describe el régimen de parámetros de la referencia [3], solamente fue necesario considerar unos pocos niveles en el PC lateral para obtener una descripción cualitativa en el régimen de acoplamiento débil entre el PC central y los electrodos.
- Analizamos la conductancia a temperatura cero y las correlaciones Kondo. Dependiendo de la paridad del número de electrones en el DPC, el sistema puede presentar un efecto Kondo a dos etapas, un solo efecto Kondo o la ausencia del mismo. Confirmamos las predicciones de la teoría de líquido de Fermi para $T \rightarrow 0$ y encontramos que la temperatura para la cual se recupera el comportamiento de líquido de Fermi puede ser extremadamente pequeña dependiendo de los parámetros, y en particular del acoplamiento túnel entre los PCs y el voltaje de compuerta sobre cada PC. Esto conduce a un mapa de conductancia con una estructura inusual a temperatura finita, en el régimen de acoplamiento fuerte entre PCs.
- Analizamos la naturaleza multinivel del PC lateral en el régimen de Kondo a dos etapas donde ocurre dos apantallamientos Kondo sucesivos cuando se baja la temperatura. La temperatura de Kondo del segundo apantallamiento depen-

de fuertemente de la separación entre niveles de energía del PC lateral y del acoplamiento túnel entre PCs.

- Consideramos un sistema con niveles cuasidegenerados sobre el PC lateral y construimos un modelo efectivo para describir el segundo efecto Kondo. Analizamos el modelo resultante por medio de la aproximación de campo medio de bosones esclavos, y en concordancia con los resultados numéricos, obtenemos un cruce desde una temperatura de Kondo grande para niveles degenerados en el PC lateral, a una temperatura de Kondo pequeña cuando el espaciamiento entre niveles en el PC lateral es del orden de la temperatura de Kondo grande.
- En el régimen de Kondo a dos etapas, el momento magnético sobre el PC lateral se acopla a un solo canal electrónico descrito por un líquido de Fermi de cuasipartículas pesadas. Este efecto Kondo multinivel ocurre en la presencia de un solo canal electrónico en lugar de múltiples canales como generalmente se esperaría para un solo PC multinivel acoplado a electrodos metálicos.
- Nuestros resultados generalizan los de la referencia [3] para el caso multinivel. Sin embargo, el análisis numérico es restringido a situaciones donde son relevantes unos pocos niveles electrónicos en el PC lateral.

6.3. Capítulo 3

- Analizamos las propiedades de un dispositivo de $N + 1$ PCs en una configuración estrella y demostramos que, como una función del acoplamiento túnel entre el PC central y los electrodos, hay un cambio de régimen entre un Kondo ferromagnético y un Kondo a dos etapas.
- En el régimen de acoplamiento débil entre el PC central y los electrodos, las propiedades a baja energía son descritas por un hamiltoniano de Kondo ferromagnético para una impureza de espín $L = (N - 1)/2$.
- En el régimen de acoplamiento fuerte entre el PC central y los electrodos, toman lugar dos efectos Kondo sucesivos cuando la temperatura disminuye. El primer efecto Kondo, es un efecto Kondo regular, y se obtiene por el apantallamiento del espín $1/2$ del PC central por los electrones de los electrodos. El segundo efecto Kondo es subapantallado, donde un espín $S = N/2$ en los PCs laterales es parcialmente apantallado y reducido a un espín $S = (N - 1)/2$ en el estado base.
- En el rango completo de valores del acoplamiento entre el PC central y los electrodos, el estado base del sistema tiene un espín $L = (N - 1)/2$ y la dinámica y la termodinámica a baja energía tienen un comportamiento singular.

- Un análisis numérico de sistemas de hasta cinco PCs laterales presenta un comportamiento singular en la densidad espectral a baja energía del PC central la cual determina las propiedades lineales de transporte del dispositivo y es accesible experimentalmente por medio de medidas espectroscópicas, en el cual uno de los electrodos está acoplado débilmente al PC central.
- Estos dispositivos de PCs permitirían la observación, del hasta ahora difícil de alcanzar efecto Kondo ferromagnético para un espín $L \geq 1/2$ y el efecto Kondo subapantallado para un espín $L \geq 1$.
- Los dispositivos con más de cinco PCs laterales pueden ser difíciles de construir, y así se restringe valores más altos en el espín en modelos de impurezas.
- Los modelos descritos también se pueden aplicar a moléculas magnéticas acopladas a electrodos o a arreglos de átomos magnéticos sobre superficies metálicas [141].

6.4. Capítulo 4

- En este capítulo estudiamos las propiedades termoeléctricas y magnetoeeléctricas de un dispositivo de tres PCs acoplados en una configuración de estrella como función de la temperatura, campo magnético y el voltaje de compuerta. El sistema presenta una gran sensibilidad a campos externos, asociados a transiciones de fase cuánticas, que se manifiestan en las propiedades de transporte. La conductancia a temperatura cero como una función del voltaje de compuerta presenta una discontinuidad que manifiesta una transición entre un régimen de líquido de Fermi singular y uno regular. Esta transición de fase cuántica se produce por un cambio en el signo del acoplamiento Kondo J_K entre un momento magnético en el arreglo de los PCs y los conductores.
- Para un acoplamiento antiferromagnético $J_K > 0$ las propiedades a baja temperatura del sistema se pueden describir con una teoría de líquido de Fermi, y la conductancia a temperatura cero está dada en términos de la ocupación total del arreglo de PCs a través de las reglas de suma de Friedel.
- Para un acoplamiento ferromagnético $J_K < 0$ el sistema está en un régimen de líquido de Fermi singular a bajas temperaturas, y satisface una regla de suma de Friedel modificada donde la carga total del arreglo de PCs es remplazada por una carga efectiva reducida. La carga efectiva se puede obtener al sustraer de la carga total del arreglo de PCs, la carga que está asociada con un momento magnético sobre el arreglo de PCs que se desacopla asintóticamente de los conductores.

- La conductancia, el poder termoeléctrico, y el número de Lorentz tienen un comportamiento logarítmico a bajas temperaturas en el régimen de Kondo ferromagnético.
- Un campo magnético externo polariza fuertemente el momento magnético asintóticamente libre y dirige al sistema dentro de un régimen de líquido de Fermi regular, produciendo un corte a baja energía para el comportamiento logarítmico de las propiedades de transporte. En este régimen, el campo magnético produce una gran pendiente a baja energía en la densidad espectral del PC central, cuyo signo depende de la proyección de espín a lo largo del campo magnético externo.
- Cerca a la condición de simetría electrón-hueco, la aplicación de un campo magnético produce un elevado coeficiente Seebeck de espín ($\sim k_B/|e|$) y a una corriente pura de espín para $k_B T \sim g\mu_B B$ en un amplio rango de campos magnéticos.
- Con la aplicación de un voltaje de compuerta, se puede sintonizar al sistema para producir corrientes de polarización de espín, debido a la supresión de la corriente de uno de las proyecciones de espín por efectos de interferencia.
- Para un acoplamiento túnel débil entre los PCs, el sistema presenta un efecto Kondo en dos etapas con un efecto Kondo antiferromagnético para un espín 1/2 seguido por un efecto Kondo subapantallado para un espín 1. En este caso, las propiedades eléctricas del sistema también presentan un comportamiento singular pero a muy bajas temperaturas.
- Debido a la elevada escala de energía donde se desarrolla el efecto Kondo ferromagnético, este régimen es más factible para poder ser observado experimentalmente que en el caso del régimen del efecto Kondo subapantallado.
- Analizamos dispositivos con más de tres PCs ($N > 2$) y encontramos un comportamiento cualitativamente idéntico al caso $N = 2$ para las propiedades termoeléctricas y magnetoeeléctricas. Las principales diferencias están en un máximo reducido del coeficiente Seebeck de espín y una escala de energía más alta $k_B T_0$ a medida que el número de PCs laterales N aumenta.

6.5. Capítulo 5

- Usando un modelo de impureza cuántica, pudimos explicar resultados experimentales de fotoluminiscencia en un amplio rango de voltajes de compuerta, incluyendo el régimen de valencia intermedia para cualquiera de los estados final o inicial.

- Un modelo molecular puede explicar cualitativamente la naturaleza de las excitaciones del máximo de intensidad en la fotoluminiscencia experimental, además de ayudarnos a entender los límites de estas excitaciones, y la presencia de una excitación X_f^- producto de una decaída desde el trión a un nivel final excitado.
- Las transiciones en la fotoluminiscencia son una realización experimental de un enfriamiento cuántico con otra realización de la catástrofe de ortogonalidad de Anderson, pero en contraste a estudios previos, en nuestro sistema las correlaciones electrónicas son importantes tanto en los estados finales e iniciales en la emisión del fotón.
- Encontramos, por medio de resultados numéricos con NRG-FDM, una marcada asimetría en los cortes de línea de la fotoluminiscencia para las decaídas del excitón y del trión encontrándose una cola larga a bajas energías causada por la catástrofe de ortogonalidad de Anderson.
- Se esbozó el comportamiento de la intensidad a varias escalas de energía, y se evidenció que, para el caso de la decaída del trión, hay tres regímenes similares a los que se obtuvieron en la referencia [131] donde hay absorción de la luz para crear un excitón. A altas energías ($\hbar\omega > U$) la física está dominada por el punto fijo de orbital libre y tiene una dependencia cuadrática con la frecuencia, a energías intermedias ($k_B T_K < \hbar\omega < U$) domina el punto fijo de momento angular que debido al enfriamiento cuántico tiene una dependencia inversa y logarítmica con la frecuencia. A bajas energías ($\hbar\omega < k_B T_K$) las correlaciones Kondo en el estado inicial son importantes, y la intensidad varía bajo una ley de potencias con la frecuencia, característica de la catástrofe de ortogonalidad de Anderson. En el régimen de valencia intermedia se tiene el mismo comportamiento como en la decaída del trión, a excepción de que no hay correlaciones Kondo ni tampoco momento local; sólo domina el comportamiento de ley de potencias a bajas energías, cuyo exponente está dominado por la diferencia entre las ocupaciones final e inicial. En la decaída del excitón, el sistema no obtiene estados tipo momento local donde decaer, cosa que se evidencia en la suave curvatura que tiene cerca a la temperatura de Kondo en comparación con la decaída del trión.
- La absorción y la emisión son cualitativamente diferentes y el régimen del momento local se puede lograr solamente en el estado final (en la absorción de un excitón o la emisión de un trión).
- Los corrimientos de energía en los bordes de las mesetas que se observan en los experimentos, son causados por la ganancia en energía debido a la hibridación,

cosa que también se evidencia en los resultados numéricos cuando se aplica un campo magnético externo.

- En presencia de un campo magnético externo, los niveles de energía del PC se desdoblan dando como resultado una fotoluminiscencia con el doble de mesetas que en el caso sin campo magnético. Estas mesetas presentan diferente ancho debido a un cambio en el exponente de la ley de potencias.
- Para el caso de la fotoluminiscencia de la decaída del excitón con campo magnético, el pico de la proyección de espín \uparrow es de mayor intensidad que el \downarrow , debido a que este último es el nivel de más alta energía y tiene un peso de Boltzmann más chico, tal como se puede ver de la ecuación 5.1.
- Cuando la energía del acoplamiento del campo magnético y el espín es más grande que la energía de Kondo, el exponente de la ley de potencias tiende a la unidad o a menos la unidad dependiendo si la carga necesita reacomodarse, ya sea en el estado inicial (del excitón) o el final (del trión).
- En el caso cuando el exponente tiende a uno, la forma de línea tiende a parecerse a una función delta de Dirac, mientras que para un exponente de menos la unidad se tiene un comportamiento máximo de catástrofe de ortogonalidad de Anderson.

Apéndice A

Reglas de suma de Friedel

En este apéndice, generalizamos las reglas de suma de Friedel para nuestro sistema. Para ello, nosotros consideremos un solo nivel electrónico en el PC a y un número N de niveles en el PC b . Por simplicidad, suponemos que el acoplamiento del PC a a los conductores Δ_D , Δ_I no dependen de la energía, y $\Delta = \Delta_D + \Delta_I$.

La función de Green local de los dos PCs está dado por:

$$\mathbf{G}_\sigma^{-1}(\omega) = \mathbf{G}_{0\sigma}^{-1}(\omega) - \Sigma_\sigma(\omega) \quad (\text{A.1})$$

donde todos los efectos de las interacciones están incluidas en la autoenergía $\Sigma_\sigma(\omega)$. La función de Green no interactuante $\mathbf{G}_{0\sigma}^{-1}(\omega)$ está dada por:

$$\mathbf{G}_{0\sigma}^{-1}(\omega) = \begin{pmatrix} \omega - \epsilon_a + i\Delta/2 & t_1 & t_2 & \cdots & t_N \\ t_1 & \omega - \epsilon_1 & 0 & \cdots & 0 \\ t_2 & 0 & \omega - \epsilon_2 & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ t_N & 0 & \cdots & 0 & \omega - \epsilon_N \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

donde ϵ_a y ϵ_i son las energías de un solo electrón asociados a los niveles en el PC a y del PC b , respectivamente, e incluimos las contribuciones de las ecuaciones 2.2 y 2.4.

La carga total por espín en el doble PC está dada en $T = 0$ por:

$$N_\sigma = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} \int_{-\infty}^0 \mathbf{G}_\sigma(\omega) d\omega \quad (\text{A.3})$$

que se puede reescribir en la forma

$$\begin{aligned} N_\sigma &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^0 d\omega \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Tr} \ln \mathbf{G}^{-1}(\omega) \\ &\quad - \frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^0 d\omega \text{Tr} \left[\mathbf{G}(\omega) \frac{\partial}{\partial \omega} \Sigma(\omega) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

usando la igualdad

$$\text{Tr} \mathbf{G}(\omega) = \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Tr} \ln \mathbf{G}^{-1}(\omega) + \text{Tr} \left[\mathbf{G}(\omega) \frac{\partial}{\partial \omega} \Sigma(\omega) \right]. \quad (\text{A.5})$$

La segunda integral del lado derecho de la ecuación A.4 tiende a cero a medida que se va aumentando el orden en teoría de perturbaciones en las interacciones locales coulombianas [89] lo cual conduce a

$$N_\sigma = \frac{1}{\pi} [\varphi(-\infty) - \varphi(0)], \quad (\text{A.6})$$

donde

$$\varphi(\omega) = \text{Tr} \ln [\mathbf{G}^{-1}(\omega)] = \ln \det [\mathbf{G}^{-1}(\omega)]. \quad (\text{A.7})$$

Como $\Sigma(\omega) \lim_{\omega \rightarrow 0} \rightarrow cte$, la parte real de $\det [\mathbf{G}^{-1}(x)]$ diverge como ω^{N+1} mientras la parte imaginaria diverge como ω^N resultando en

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \text{Im} \ln \det [\mathbf{G}^{-1}(\omega)] = c\pi \quad (\text{A.8})$$

donde c es un entero. Suponiendo un estado base de líquido de Fermi, tenemos $\text{Im} [\Sigma(0)] = 0$ y obtenemos

$$\mathbf{G}_\sigma^{-1}(0) = \begin{pmatrix} -\tilde{\epsilon}_d + i\Delta/2 & \tilde{t}_{a1} & \tilde{t}_{a2} & \cdots & \tilde{t}_{aN} \\ \tilde{t}_{1a} & -\tilde{\epsilon}_1 & \tilde{t}_{12} & \cdots & \tilde{t}_{1N} \\ \tilde{t}_{2a} & \tilde{t}_{12} & -\tilde{\epsilon}_2 & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \tilde{t}_{(N-1)N} \\ \tilde{t}_{Na} & \tilde{t}_{1N} & \cdots & \tilde{t}_{(N-1)N} & -\tilde{\epsilon}_N \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

$$N_\sigma = -\frac{1}{\pi} \arctan \left\{ \frac{\text{Im} \det [\mathbf{G}_\sigma^{-1}(0)]}{\text{Re} \det [\mathbf{G}_\sigma^{-1}(0)]} \right\} + c \quad (\text{A.10})$$

Usando la expansión Laplaciana para el determinante y que los coeficientes $\{\tilde{t}_{ij}\}$ y $\{\tilde{\epsilon}_i\}$ son reales, encontramos que

$$\tan^2(\pi N_\sigma) = \left\{ \frac{\Delta D_1/2}{\text{Re} \det [\mathbf{G}_\sigma^{-1}(0)]} \right\}^2. \quad (\text{A.11})$$

donde D_1 es el determinante de la submatriz de $\mathbf{G}_{aa\sigma}^{-1}(0)$ obtenido al suprimir la primera fila y la primera columna.

La conductancia a temperatura cero por espín a través del sistema está dada por:

$$G_\sigma = \frac{e^2}{\hbar} \frac{\Delta_D \Delta_I}{\Delta_D + \Delta_I} A_{a\sigma}(0) \quad (\text{A.12})$$

donde

$$A_{a\sigma}(0) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\mathbf{G}_{aa\sigma}(0)] . \quad (\text{A.13})$$

Usando las reglas de Cramer para la inversa y la ecuación A.9 nosotros obtenemos

$$\mathbf{G}_{aa\sigma}(0) = \frac{D_1}{i\Delta D_1/2 + \text{Re det} [\mathbf{G}_\sigma^{-1}(0)]} \quad (\text{A.14})$$

y usando la ecuación A.11 tenemos

$$A_{a\sigma}(0) = \frac{2}{\pi\Delta} \sin^2(\pi N_\sigma) \quad (\text{A.15})$$

y finalmente

$$G_\sigma = \tilde{\alpha} \frac{e^2}{h} \sin^2(\pi N_\sigma), \quad (\text{A.16})$$

donde $\tilde{\alpha} = \frac{4\Delta_I\Delta_D}{(\Delta_I+\Delta_D)^2}$

Apéndice B

Tratamiento con bosones esclavos

B.1. Deducción del Hamiltoniano efectivo para un sistema con simetría SU(N), y solución de las ecuaciones de movimiento

Tomemos los términos que dependen de la energía de intercambio J del Hamiltoniano de la ecuación 2.18 cuya simetría es SU(2). Este hamiltoniano se puede extender fácilmente a otro con simetría SU(N), por ejemplo el primer término del hamiltoniano ($\mathbf{S}_b \cdot \mathbf{s}'_0$) ya se ha expandido en SU(N) ([19, 142]) y el resultado es:

$$\mathbf{S}_b \cdot \mathbf{s}'_0 \rightarrow \frac{1}{N} \sum_{i\alpha\beta} b_{i\alpha}^\dagger b_{i\beta} f_{0\beta}^\dagger f_{0\alpha}, \quad (\text{B.1})$$

con $i = 1, 2$. En este caso para que el modelo SU(N) sea igual al de SU(2) cuando $N = 2$ se debe adicionar un potencial de dispersión en las cuasipartículas de Fermi, el cual no es un término relevante a la hora de describir la física del sistema. Ahora para extender el término $\sum_{\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} \mathbf{S}_{bj} \cdot \mathbf{s}'_0$ ($i \neq j$) del hamiltoniano 2.18 a SU(N), se expande $\mathbf{S}_{bj} \cdot \mathbf{s}'_0$ como en el caso anterior, y sin pérdida de generalidad obtenemos:

$$\sum_{\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} \mathbf{S}_{bj} \cdot \mathbf{s}'_0 \rightarrow \frac{1}{N} \sum_{\alpha\beta} b_{i\alpha}^\dagger b_{j\beta} f_{0\beta}^\dagger f_{0\alpha}. \quad (\text{B.2})$$

Reemplazando B.1 y B.2 en 2.18 tenemos el hamiltoniano con simetría SU(N):

$$H_N = \frac{J}{N} \sum_{ij\alpha\beta} b_{i\alpha}^\dagger b_{j\beta} f_{0\beta}^\dagger f_{0\alpha}, \quad (\text{B.3})$$

donde en este caso i sí puede ser igual a j . Ahora definamos el siguiente operador bosónico

$$\hat{Q} = \sum_i \hat{q}_i, \quad (\text{B.4})$$

con $\hat{q}_i = (J/N) \sum_{\alpha} f_{0\alpha} b_{i\alpha}^\dagger$, y el hamiltoniano en términos de este bosón es:

$$H_N = \sum_{i\alpha} (\hat{Q}^\dagger b_{i\alpha}^\dagger f_{0\alpha} + h.c.) + \frac{N}{J} \hat{Q}^\dagger \hat{Q}. \quad (\text{B.5})$$

Cuando $N \rightarrow \infty$, podemos reemplazar el operador \hat{Q} por su valor medio más las fluctuaciones de la siguiente forma:

$$\frac{\hat{Q}}{J} = \frac{1}{N} \sum_{i\alpha} \langle f_{0\alpha} b_{i\alpha}^\dagger \rangle + \frac{1}{N} \sum_{i\alpha} \delta_{i\alpha}. \quad (\text{B.6})$$

El primer término es el valor medio de algún α , y ya que todos los α son degenerados, los valores medios dentro de la sumatoria del primer término son todos iguales. Entonces la sumatoria en α da simplemente N que se cancela con el denominador. En el segundo término $\delta_{i\alpha}$ son fluctuaciones aleatorias, cuya sumatoria da \sqrt{N} , y así queda un \sqrt{N} en el denominador que suprime estas fluctuaciones cuando $N \rightarrow \infty$. De este modo hemos comprobado que cuando $N \rightarrow \infty$ entonces $\hat{Q} \rightarrow \langle \hat{Q} \rangle$ y, sin pérdida de generalidad, podemos escoger $Q = \langle \hat{Q} \rangle = \langle \hat{Q}^\dagger \rangle$. Así H_N queda:

$$H_N = Q \sum_{i\alpha} (b_{i\alpha}^\dagger f_{0\alpha} + h.c.) + \frac{N}{J} Q^2. \quad (\text{B.7})$$

Cuando $N = 2$ no es exacto tomar el valor medio de \hat{Q} , pero en esta tesis encontramos resultados cualitativos cuando se toma esta aproximación. Si reemplazamos los términos que tienen el acoplamiento de intercambio J del hamiltoniano 2.18 por H_N de la ecuación B.7 cuando $N = 2$, nos queda el hamiltoniano \tilde{H} de la ecuación 2.21 más una constante Q^2 .

En lo que sigue deduciremos las funciones de Green $\tilde{\mathbf{G}}_{11\sigma}$, $\tilde{\mathbf{G}}_{22\sigma}$, $\tilde{\mathbf{G}}_{01\sigma}$ y $\tilde{\mathbf{G}}_{02\sigma}$, y para ello vamos a introducir las ecuaciones de movimiento de una función de Green retardada. La función de Green retardada para dos operadores fermiónicos A y B se etiqueta como $G_{AB} = \langle\langle A; B \rangle\rangle$, y de la ecuación de movimiento para esta función de Green en un sistema dominado por el hamiltoniano H es [143]:

$$\omega \langle\langle A; B \rangle\rangle = \langle\{A, B\}\rangle + \langle\langle [A, H]; B \rangle\rangle \quad (\text{B.8})$$

donde $\langle\{A, B\}\rangle$ es el valor medio del anticonmutador de A con B , y $[A, H]$ es el conmutador de A con H . Al aplicar esta ecuación para calcular $\tilde{\mathbf{G}}_{ii\sigma} = \langle\langle b_{i\sigma}; b_{i\sigma}^\dagger \rangle\rangle$ ($i = \{1, 2\}$)

obtenemos:

$$\begin{aligned}\omega \tilde{\mathbf{G}}_{ii\sigma} &= \langle \{b_{i\sigma}, b_{i\sigma}^\dagger\} \rangle + \langle \langle [b_{i\sigma}, \tilde{H}]; b_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle \\ &= 1 + (\delta_{2i}\delta + \lambda)\tilde{\mathbf{G}}_{ii\sigma} + \tilde{J}\tilde{\mathbf{G}}_{0i\sigma}\end{aligned}\quad (\text{B.9})$$

donde el conmutador $[b_{i\sigma}, \tilde{H}] = (\delta_{2i}\delta + \lambda)b_{i\sigma}\delta_{2i} + \tilde{J}f_{0\sigma}$, y δ_{2i} es la función delta de Kronecker entre i y 2. Ahora la ecuación de movimiento para $\langle \langle f_{k\sigma}; b_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle$ es:

$$\omega \langle \langle f_{k\sigma}; b_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \epsilon'_k \langle \langle f_{k\sigma}; b_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle + \tilde{J} \left(\tilde{\mathbf{G}}_{ii\sigma} + \tilde{\mathbf{G}}_{i'i\sigma} \right), \quad (\text{B.10})$$

donde $i \neq i'$, $\{f_{k\sigma}, b_{i\sigma}^\dagger\} = 0$, y $[f_{k\sigma}, \tilde{H}] = \epsilon'_k f_{k\sigma} + \tilde{J}(b_{i\sigma} + b_{i'\sigma})$. Despejando $\langle \langle f_{k\sigma}; b_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle$ y sumando a ambos lados en k tenemos:

$$\tilde{\mathbf{G}}_{0i\sigma} = -i\pi\rho_{ef}\tilde{J}(\tilde{\mathbf{G}}_{ii\sigma} + \tilde{\mathbf{G}}_{i'i\sigma}), \quad (\text{B.11})$$

donde $\tilde{\mathbf{G}}_{0i\sigma} = \langle \langle f_{0\sigma}; b_{i\sigma}^\dagger \rangle \rangle$ con $f_{0\sigma} = \sum_k f_{k\sigma}$, y usamos que $\sum_k 1/(w - \epsilon'_k) \approx -i\pi\rho_{ef}$ [19]. Usando la ecuación de movimiento y haciendo el mismo procedimiento tenemos que $\tilde{\mathbf{G}}_{i'i\sigma}$ es:

$$\tilde{\mathbf{G}}_{i'i\sigma} = \frac{1}{\omega - \lambda - \delta_{i'2}\delta} \tilde{J}\tilde{\mathbf{G}}_{0i\sigma}. \quad (\text{B.12})$$

Reemplazando B.12 en B.11 y despejando $\tilde{\mathbf{G}}_{0i\sigma}$

$$\tilde{\mathbf{G}}_{0i\sigma} = \frac{-i\pi\rho_{ef}\tilde{J}(\omega - \lambda - \delta_{i'2}\delta)}{\omega - \lambda - \delta_{i'2}\delta + i\pi\rho_{ef}\tilde{J}^2} \tilde{\mathbf{G}}_{ii\sigma}, \quad (\text{B.13})$$

para ser reemplazado en B.9 obtenemos que:

$$\tilde{\mathbf{G}}_{ii\sigma} = \frac{\omega - \lambda - \delta_{i'2}\delta + i\pi\rho_{ef}\tilde{J}^2}{(\omega - \lambda)(\omega - \lambda - \delta) + i\pi\rho_{ef}\tilde{J}^2[2(\omega - \lambda) - \delta]}. \quad (\text{B.14})$$

Ahora reemplazando $\tilde{\mathbf{G}}_{ii\sigma}$ en B.13 tenemos

$$\tilde{\mathbf{G}}_{0i\sigma} = \frac{-i\pi\rho_{ef}\tilde{J}(\omega - \lambda - \delta_{i'2}\delta)}{(\omega - \lambda)(\omega - \lambda - \delta) + i\pi\rho_{ef}\tilde{J}^2[2(\omega - \lambda) - \delta]}. \quad (\text{B.15})$$

Ahora las ecuaciones 2.21 y 2.22 a temperatura cero son:

$$q_i = -\frac{1}{\pi} \int_{-T_K}^0 d\omega \text{Im} [\tilde{\mathbf{G}}_{0i\sigma}] = \rho_{ef}\tilde{J} \int_{-T_K}^0 d\omega \text{Re} [\tilde{\mathbf{G}}'_{0i\sigma}], \quad (\text{B.16})$$

donde

$$\tilde{\mathbf{G}}'_{0i\sigma} = \frac{\omega - \lambda - \delta_{i'2}\delta}{(\omega - \lambda)(\omega - \lambda - \delta) + i\pi\rho_{ef}\tilde{J}^2[2(\omega - \lambda) - \delta]}. \quad (\text{B.17})$$

Sabiendo que $\tilde{J} = J(q_1 + q_2)$ y usando B.16 tenemos que

$$\frac{1}{\rho_{ef}\tilde{J}} = - \int_{-T_K}^0 d\omega \operatorname{Re} \left[\tilde{\mathbf{G}}'_{01\sigma} + \tilde{\mathbf{G}}'_{02\sigma} \right], \quad (\text{B.18})$$

y sabiendo que de la minimización de la energía libre con respecto a λ produce una ocupación total de 1, tenemos:

$$N_1 + N_2 = -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^0 d\omega \operatorname{Im} \left[\tilde{\mathbf{G}}_{11\sigma} + \tilde{\mathbf{G}}_{22\sigma} \right] = 1. \quad (\text{B.19})$$

La solución numérica autoconsistente de las ecuaciones B.18 y B.19 nos proporciona el valor de $T_K^* = \pi\rho_{ef}\tilde{J}^2$ y λ para un δ dado. Las integrales anteriores las resolver analíticamente, y para ello, nosotros separamos la parte imaginaria o real de las funciones de Green en cuatro términos cuyo denominador está dado por una raíz del denominador de la función de Green, es decir:

$$\operatorname{Im} \left[\tilde{\mathbf{G}}_{ij\sigma} \right] = \frac{a}{\omega - \omega_a} + \frac{b}{\omega - \omega_b} + \frac{c}{\omega - \omega_c} + \frac{d}{\omega - \omega_d}, \quad (\text{B.20})$$

donde $\omega_a, \omega_b, \omega_c$ y ω_d , son las raíces del denominador de $\operatorname{Im} \left[\tilde{\mathbf{G}}_{ij\sigma} \right]$. Todas las funciones de Green comparten el mismo denominador, así que todas tienen las mismas raíces. Estas raíces son:

$$\begin{aligned} \omega_{\{a/b\}} &= \frac{1}{2} \left[\delta \mp \left(\delta^2 - 8T_K^{*2} - 4T_K^* \sqrt{4T_K^{*2} - \delta^2} \right)^{1/2} \right], \\ \omega_{\{c/d\}} &= \frac{1}{2} \left[\delta \mp \left(\delta^2 - 8T_K^{*2} + 4T_K^* \sqrt{4T_K^{*2} - \delta^2} \right)^{1/2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Los coeficientes a, b, c y d se calculan comparando la parte derecha con la izquierda de la ecuación B.20. Para $\operatorname{Re} \left[\tilde{\mathbf{G}}'_{01\sigma} + \tilde{\mathbf{G}}'_{02\sigma} \right]$ los coeficientes son:

$$\{a/c\} = \frac{1}{2} \pm \frac{T_K^*}{\sqrt{4T_K^{*2} - \delta^2}}, \quad (\text{B.22})$$

y los otros coeficientes son $b = a$ y $d = c$. Para $\operatorname{Im} \left[\tilde{\mathbf{G}}_{11\sigma} + \tilde{\mathbf{G}}_{22\sigma} \right]$ los coeficientes son:

$$i\{b'/c'\} = \frac{\sqrt{4T_K^{*2} - \delta^2} \pm 2T_K^*}{\left(8T_K^{*2} - \delta^2 \pm 4T_K^* \sqrt{4T_K^{*2} - \delta^2} \right)^{1/2}}, \quad (\text{B.23})$$

y los otros coeficientes son $a' = -b'$ y $d' = -c'$. Con todo esto las integrales de las ecuaciones B.18 y B.19 se pueden calcular fácilmente. Haciendo un poco de álgebra,

los resultados son:

$$-\frac{1}{\rho_{ef}J} = a \ln[(\omega - \omega_a)(\omega - \omega_b)]_{T_K - \lambda}^{-\lambda} + c \ln[(\omega - \omega_c)(\omega - \omega_d)]_{T_K - \lambda}^{-\lambda}, \quad (\text{B.24})$$

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{2} = & b' \arctan \left[\frac{2\omega - \delta}{\left(8T_K^{*2} - \delta^2 + 4T_K^* \sqrt{4T_K^{*2} - \delta^2}\right)^{1/2}} \right]_{T_K - \lambda}^{-\lambda} \\ & - c' \arctan \left[\frac{2\omega - \delta}{\left(8T_K^{*2} - \delta^2 - 4T_K^* \sqrt{4T_K^{*2} - \delta^2}\right)^{1/2}} \right]_{T_K - \lambda}^{-\lambda}. \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

Haciendo un análisis similar nosotros encontramos que las ocupaciones en cada nivel son:

$$\begin{aligned} N_{\{1,2\}} = \frac{1}{2} \pm \frac{\delta}{\pi \sqrt{4T_K^{*2} - \delta^2}} \times & \{ \ln[(\omega - \omega_a)(\omega - \omega_b)] \\ & + \ln[(\omega - \omega_c)(\omega - \omega_d)] \}_{T_K - \lambda}^{-\lambda}. \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Finalmente la solución numérica de las ecuaciones B.18 y B.19 da que $\lambda = 0$ para todo δ , y un determinado valor de T_K^* para un δ dado.

B.2. Ecuaciones de movimiento con integrales de camino

La función de partición expresada en forma de integrales de camino para algún operador fermiónico c es:

$$\begin{aligned} Z &= \int D[c^\dagger, c] \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau [c^\dagger(\tau)(\partial_\tau + H_0)c(\tau)] \right\} \\ &= \det[\partial_\tau + H] = \det[-G^{-1}(\tau - \tau')] \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

donde la función de Green es $G(\tau - \tau') = -(\partial_\tau + H)^{-1}$, H_0 es la forma matricial de un hamiltoniano no interactuante, y $\beta = 1/T$ el inverso de la temperatura T . La función de partición con fuentes j^\dagger y j es:

$$\begin{aligned} Z[j^\dagger, j] &= \int D[c^\dagger, c] \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau [c^\dagger(\tau)(\partial_\tau + H_0)c(\tau) - j(\tau)^\dagger c(\tau) - c^\dagger(\tau)j(\tau)] \right\} \\ &= \det[-G^{-1}(\tau - \tau')] \exp \left[- \int_0^\beta d\tau d\tau' j^\dagger(\tau) G[\tau - \tau'] j(\tau') \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

Si dentro del hamiltoniano se tiene una interacción atractiva tipo $H_I = -g \sum_j A_j^\dagger A_j$, donde A_j representa un operador bilineal de electrones (tal como la densidad de espín de un modelo de espín x-y, o la densidad de pares de electrones), la integral de camino ya no es gaussiana y por ende no tiene una solución analítica exacta. Las transformaciones de Hubbard Stratonovich [144] pone campos bosónicos auxiliares Q_j en la integral de camino de tal forma que se puede hacer el siguiente reemplazo $-g A_j^\dagger A_j \rightarrow A_j^\dagger Q_j + Q_j^\dagger A_j + Q_j^\dagger Q_j/g$. Esto es fácil de comprobar usando la ecuación B.28 con $\partial_\tau + H_0 \rightarrow 1/g$, $c \rightarrow Q_j$ y $j \rightarrow A_j$ la siguiente relación:

$$\exp \left[- \int_0^\beta d\tau H_I \right] \propto \int D[Q^\dagger, Q] \exp \left[- \sum_j \int_0^\beta d\tau A_j^\dagger Q_j + Q_j^\dagger A_j + Q_j^\dagger Q_j/g \right]. \quad (\text{B.29})$$

La constante de proporcionalidad es irrelevante a la hora de calcular la energía libre $F = T \ln(Z)$ ya que ésta actúa como una constante de energía. Ahora si metemos la ecuación B.29 dentro de B.27, nos queda:

$$Z = \int D[Q^\dagger, Q] \exp \left[- \sum_j \int_0^\beta d\tau Q_j^\dagger Q_j/g \right] \int D[c^\dagger, c] \exp [-S_{ef}] \quad (\text{B.30})$$

$$S_{ef} = \int_0^\beta d\tau [c^\dagger(\tau) \partial_\tau c(\tau) + H_{ef}(Q^\dagger, Q)] \quad (\text{B.31})$$

donde

$$H_{ef}(Q^\dagger, Q) = c^\dagger(\tau) H_0 c(\tau) + \sum_j \left(A_j^\dagger Q_j + Q_j^\dagger A_j \right). \quad (\text{B.32})$$

Si el hamiltoniano es como el SU(N) de la ecuación B.3 y definimos Q como en la ecuación B.4, el primer término de la función de partición sería $\int D[Q^\dagger, Q] \exp \left[- \int_0^\beta d\tau N Q^\dagger Q/J \right]$ y de aquí vemos que si $N \rightarrow \infty$ el único valor relevante de Q que contribuye significativamente a la integral es el valor medio de Q ya que el resto está suprimido por la exponencial. Entonces podemos ver que tomar el valor medio de Q es exacto en un modelo SU(N) cuando $N \rightarrow \infty$, este es el llamado punto de silla. En SU(2) si tomamos el hamiltoniano efectivo $H_{ef} = \tilde{H}$ con \tilde{H} como en la ecuación 2.21, la aproximación de punto de silla $\tilde{J} = Q = \langle Q \rangle = \langle Q^\dagger \rangle$, y los campos $c_{0\sigma} = 1/\sqrt{\beta} \sum_n c_{0\sigma n} \exp[i\omega_n \tau]$, $f_{i\sigma} = 1/\sqrt{\beta} \sum_n f_{i\sigma n} \exp[i\omega_n \tau]$, donde $\omega_n = \pi(2n+1)/\beta$ son las frecuencias de Matsubara fermiónica, la función de partición es:

$$Z = \exp \left[- \frac{2\beta \tilde{J}^2}{J} + \beta \lambda \right] \int D[K^\dagger, K] \exp \left[\sum_{\sigma n} K_{\sigma n}^\dagger \tilde{\mathbf{G}}_{\sigma n}^{-1} K_{\sigma n} \right], \quad (\text{B.33})$$

donde $K_{\sigma n}$ es un vector cuyas componentes son $c_{0\sigma n}, f_{1\sigma n}, f_{2\sigma n}$ y

$$\tilde{\mathbf{G}}_{\sigma}(i\omega_n) = \begin{pmatrix} \Gamma(i\omega_n)^{-1} & \tilde{J} & \tilde{J} \\ \tilde{J} & i\omega_n - \lambda & 0 \\ \tilde{J} & 0 & i\omega_n - \delta - \lambda \end{pmatrix}^{-1}, \quad (\text{B.34})$$

donde $\Gamma(i\omega_n) = \sum_k \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_k} = -i\pi\rho_{ef}\text{sig}(\omega_n)$ (ver página 545 de [144]), y ρ_{ef} es la densidad de estados local de las cuasipartículas en el PC a , definido en la sección 2.6.1. Integrando sobre K^\dagger y K obtenemos:

$$Z = \prod_{\sigma n} \det \left(-\tilde{\mathbf{G}}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) \right) \exp \left[-\frac{2\beta\tilde{J}^2}{J} + \beta\lambda \right], \quad (\text{B.35})$$

y la energía libre es:

$$F = -2\frac{\tilde{J}^2}{J} + \lambda + \frac{1}{\beta} \sum_{\sigma n} \ln \left[\det \left(-\tilde{\mathbf{G}}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) \right) \right]. \quad (\text{B.36})$$

Resolviendo la sumatoria en las frecuencias de Matsubara por medio del método de integración estándar de contorno, obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_n \ln \left[\det \left(-\tilde{\mathbf{G}}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) \right) \right] &= \oint_{\text{ejeIm}} \frac{dz}{2\pi i} f(z) \ln \left[\det \left(-\tilde{\mathbf{G}}_{\sigma}^{-1}(z) \right) \right] \\ &= \oint_{\text{ejeRe}} \frac{dz}{2\pi i} f(z) \ln \left[\det \left(-\tilde{\mathbf{G}}_{\sigma}^{-1}(z) \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

En la ecuación anterior se puede elegir un contorno en el eje real debido a la existencia de un "branch cut" (un rango donde la función es indefinida) en $\Gamma(z)$ en el intervalo $[-T_K, T_K]$, donde T_K es el semiancho de banda de las cuasipartículas de líquido de Fermi. Dicho lo anterior tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_n \ln \left[\det \left(-\tilde{\mathbf{G}}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) \right) \right] &= \int_{-T_K}^{T_K} \frac{dz}{2\pi i} f(z) \left\{ \ln \left[\det \left(-\tilde{\mathbf{G}}_{\sigma}^{-1}(z - i\epsilon) \right) \right] - c.c \right\} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-T_K}^{T_K} d\omega f(\omega) \text{Im} \left\{ \ln \left[\det \left(-\tilde{\mathbf{G}}_{\sigma}^{-1}(\omega - i\epsilon) \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

donde ϵ es una cantidad infinitesimal positiva. Finalmente la función de partición es:

$$F = -2\frac{\tilde{J}^2}{J} + \lambda + \frac{2}{\pi} \int_{-T_K}^{T_K} d\omega f(\omega) \text{Im} \left\{ \ln \left[\det \left(-\tilde{\mathbf{G}}_{\sigma}^{-1}(\omega - i\epsilon) \right) \right] \right\}, \quad (\text{B.39})$$

donde el 2 en la integral es por la degeneración de espín. En el límite de temperatura cero, y al minimizar la energía libre con respecto a \tilde{J} y λ , se reproducen las ecuaciones

de movimiento [B.18](#) y [B.19](#).

Bibliografía

- [1] Bulla, R., Costi, T. A., Pruschke, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Rev. Mod. Phys.*, **80**, 395–450, Apr 2008. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.395>. vii, viii, 1, 12
- [2] Krishna-murthy, H. R., Wilkins, J. W., Wilson, K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. ii. static properties for the asymmetric case. *Phys. Rev. B*, **21**, 1044–1083, Feb 1980. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.21.1044>. viii, 11, 14
- [3] Baines, D. Y., Meunier, T., Mailly, D., Wieck, A. D., Bäuerle, C., Saminadayar, L., *et al.* Transport through side-coupled double quantum dots: From weak to strong interdot coupling. *Phys. Rev. B*, **85**, 195117, May 2012. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.195117>. ix, 22, 23, 26, 27, 28, 33, 84, 85
- [4] Kleemans, N. A. J. M., van Bree, J., Govorov, A. O., Keizer, J. G., Hamhuis, G. J., Notzel, R., *et al.* Many body exciton states in self assembled quantum dots coupled to a Fermi sea. *Nature*, **6**, 534, 2010. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nphys1673>. xiii, xiii, xiv, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77
- [5] Helmes, R. W., Sindel, M., Borda, L., von Delft, J. Absorption and emission in quantum dots: Fermi surface effects of Anderson excitons. *Phys. Rev. B*, **72**, 125301, Sep 2005. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.125301>. xiii, 4, 71
- [6] Kastner, M. A. Artificial atoms. *Phys. Today*, **46** (1), 24–31, 1993. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/magazine/physicstoday/article/46/1/10.1063/1.881393>. 2
- [7] Ashoori, R. Electrons in artificial atoms. *Nature*, **380**, 559, Apr 1996. URL <http://dx.doi.org/10.1038/380559b0>. 2
- [8] Delagebeaudeuf, D., Linh Nuyen, T. Metal-(n) AlGaAs - GaAs two-dimensional

- electron gas FET. *IEEE*, **29**, 955 – 960, Jun 1982. URL <http://doi.org/10.1109/T-ED.1982.20813>. 3
- [9] Kastner, M. A. Mesoscopic physics and artificial atoms. *AIP Conf. Proc.*, **275**, 573, 1993. URL <http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.43770>. 3
- [10] Moison, J. M., Houzay, F., Barthe, F., Leprince, L., André, E., Vatel. Self organized growth of regular nanometer scale InAs dots on GaAs. *Appl. Phys. Lett.*, **64** (2), 196–198, 1994. URL <http://dx.doi.org/10.1063/1.111502>. 4
- [11] Marzin, J. Y., Gérard, J. M., Izraël, A., Barrier, D., Bastard, G. Photoluminescence of single InAs quantum dots obtained by self-organized growth on GaAs. *Phys. Rev. Lett.*, **73**, 716–719, Aug 1994. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.73.716>. 4
- [12] Solomon, G. S., Trezza, J. A., Harris, J. S. Effects of monolayer coverage, flux ratio, and growth rate on the island density of InAs islands on GaAs. *Appl. Phys. Lett.*, **66** (23), 3161–3163, 1995. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/66/23/10.1063/1.113709>. 4
- [13] Karrai, K., Warburton, R. J., Schulhauser, C., Hoge, A., Urbaszek, B., McGhee, E. J., *et al.* Hybridization of electronic states in quantum dots through photon emission. *Nature*, **427** (135), 135–138, 2004. URL http://www.nature.com/nature/journal/v427/n6970/supinfo/nature02109_S1.html. 4
- [14] Goldhaber-Gordon, D., Shtrikman, H., Mahalu, D., Abusch-Magder, D., Meirav, U., Kastner, M. A. Kondo effect in a single-electron transistor. *Nature*, **391**, 156–159, 1998. URL <http://dx.doi.org/10.1038/34373>. 4
- [15] Cronenwett, S. M., Oosterkamp, T. H., Kouwenhoven, L. P. A tunable Kondo effect in quantum dots. *Science*, **281** (5376), 540–544, 1998. URL <http://science.sciencemag.org/content/281/5376/540>. 4
- [16] Franck, J. P., Manchester, F. D., Douglas, L. M. The specific heat of pure copper and of some dilute copper+iron alloys showing a minimum in the electrical resistance at low temperatures. *Proc. R. Soc. Lond.*, **263**, 494–507, Oct 1961. URL <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1961.0176>. 4
- [17] Kondo, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Prog. Theor. Phys.*, **32**, 37–49, Oct 1964. URL <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1961.0176>. 4
- [18] Anderson, P. W. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.*, **124**, 41–53, Oct 1961. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.124.41>. 5

- [19] Hewson, A. C. Models of magnetic impurities. En: The Kondo Problem to Heavy Fermions. Cambridge University Press, New York, 1993. 5, 6, 41, 95, 97
- [20] Nozières, P. A Fermi-liquid description of the Kondo problem at low temperatures. *J. Low Temp. Phys.*, **17** (1), 31–42, 1974. URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF00654541>. 6, 43, 44
- [21] Varma, C., Nussinov, Z., van Saarloos, W. Singular or non-Fermi liquids. *Phys. Rep.*, **361** (5–6), 267 – 417, 2002. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157301000606>. 7
- [22] Mehta, P., Andrei, N., Coleman, P., Borda, L., Zarand, G. Regular and singular Fermi-liquid fixed points in quantum impurity models. *Phys. Rev. B*, **72**, 014430, Jul 2005. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.014430>. 7, 30, 43
- [23] Roch, N., Florens, S., Costi, T. A., Wernsdorfer, W., Balestro, F. Observation of the underscreened Kondo effect in a molecular transistor. *Phys. Rev. Lett.*, **103** (19), 197202, nov. 2009. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.197202>. 7, 43
- [24] Koller, W., Hewson, A. C., Meyer, D. Singular dynamics of underscreened magnetic impurity models. *Phys. Rev. B*, **72**, 045117, Jul 2005. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.045117>. 7, 30, 43, 53
- [25] Kuzmenko, T., Kikoin, K., Avishai, Y. Tunneling through triple quantum dots with mirror symmetry. *Phys. Rev. B*, **73**, 235310, Jun 2006. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.235310>. 7, 44, 60
- [26] Mitchell, A. K., Jarrold, T. F., Logan, D. E. Quantum phase transition in quantum dot trimers. *Phys. Rev. B*, **79**, 085124, Feb 2009. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.085124>.
- [27] Mitchell, A. K., Jarrold, T. F., Galpin, M. R., Logan, D. E. Local moment formation and Kondo screening in impurity trimers. *J. Phys. Chem. B*, **117** (42), 12777–12786, 2013. URL <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp401936s>.
- [28] Baruselli, P. P., Requist, R., Fabrizio, M., Tosatti, E. Ferromagnetic Kondo effect in a triple quantum dot system. *Phys. Rev. Lett.*, **111**, 047201, Jul 2013. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.047201>. 7, 30, 44, 47, 60

- [29] Cornaglia, P. S., Usaj, G., Balseiro, C. A. Tunable charge and spin Seebeck effects in magnetic molecular junctions. *Phys. Rev. B*, **86** (4), 041107, jul. 2012. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.041107>. 8, 22, 43, 60
- [30] Dong, B., Lei, X. L. Effect of the kondo correlation on the thermopower in a quantum dot. *J. Phys.: Condens. Matter*, **14** (45), 11747, 2002. URL <http://stacks.iop.org/0953-8984/14/i=45/a=316>. 8
- [31] Jauho, A.-P., Wingreen, N. S., Meir, Y. Time-dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems. *Phys. Rev. B*, **50**, 5528–5544, Aug 1994. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.5528>. 8
- [32] Anderson, P. W. Infrared catastrophe in Fermi gases with local scattering potentials. *Phys. Rev. Lett.*, **18**, 1049–1051, Jun 1967. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.18.1049>. 10, 70
- [33] Nozières, P., Dominicis, C. T. Singularities in the x-ray absorption and emission of metals. iii. One-body theory exact solution. *Phys. Rev.*, **178**, 1097–1107, Feb 1969. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.178.1097>. 11
- [34] Wilson, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, **47**, 773–840, Oct 1975. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.47.773>. 11, 51
- [35] Cragg, D. M., Lloyd, P., Nozières, P. On the ground states of some s-d exchange kondo hamiltonians. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **13** (5), 803, 1980. URL <http://stacks.iop.org/0022-3719/13/i=5/a=011>. 12
- [36] Yoshida, M., Whitaker, M. A., Oliveira, L. N. Renormalization-group calculation of excitation properties for impurity models. *Phys. Rev. B*, **41**, 9403–9414, May 1990. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.9403>. 15
- [37] Vivaldo L. Campo, J., Oliveira, L. N. Alternative discretization in the numerical renormalization-group method. *Phys. Rev. B*, **72**, 104432, Sept 2005. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.104432>. 15
- [38] Anders, F. B., Schiller, A. Spin precession and real-time dynamics in the kondo model: Time-dependent numerical renormalization-group study. *Phys. Rev. B*, **74**, 245113, Dec 2006. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.245113>. 16, 18
- [39] Weichselbaum, A., von Delft, J. Sum-rule conserving spectral functions from the numerical renormalization group. *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 076402, Aug 2007. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.076402>. 16

- [40] Merker, L., Weichselbaum, A., Costi, T. A. Full density-matrix numerical renormalization group calculation of impurity susceptibility and specific heat of the Anderson impurity model. *Phys. Rev. B*, **86**, 075153, Aug 2012. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.075153>. 16
- [41] Cornaglia, P. S., Grempel, D. R. Strongly correlated regimes in a double quantum dot device. *Phys. Rev. B*, **71** (7), 075305, Feb 2005. URL <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.71.075305>. 21, 22, 30, 31, 51
- [42] Ferreira, I. L., Orellana, P. A., Martins, G. B., Souza, F. M., Vernek, E. Capacitively coupled double quantum dot system in the Kondo regime. *Phys. Rev. B*, **84**, 205320, Nov 2011. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.205320>. 21
- [43] Potok, R. M., Rau, I. G., Shtrikman, H., Oreg, Y., Goldhaber-Gordon, D. Observation of the two-channel Kondo effect. *Nature*, **446** (7132), 167–171, mar. 2007. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nature05556>. 22
- [44] Simon, P., Salomez, J., Feinberg, D. Transport spectroscopy of a Kondo quantum dot coupled to a finite size grain. *Phys. Rev. B*, **73**, 205325, May 2006. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.205325>. 22
- [45] Thimm, W. B., Kroha, J., von Delft, J. Kondo box: A magnetic impurity in an ultrasmall metallic grain. *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 2143–2146, Mar 1999. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.82.2143>.
- [46] Hu, H., Zhang, G.-M., Yu, L. Mesoscopic Kondo screening effect in a single-electron transistor embedded in a metallic ring. *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 5558–5561, Jun 2001. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.5558>.
- [47] Simon, P., Affleck, I. Finite-size effects in conductance measurements on quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, **89**, 206602, Oct 2002. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.89.206602>.
- [48] Cornaglia, P. S., Balseiro, C. A. Transport through quantum dots in mesoscopic circuits. *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 216801, May 2003. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.216801>.
- [49] Cornaglia, P. S., Balseiro, C. A. Kondo impurities in nanoscopic systems: Confinement-induced regimes. *Phys. Rev. B*, **66**, 115303, Sep 2002. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.115303>.

- [50] Lobos, A., Aligia, A. One- and many-body effects on mirages in quantum corrals. *Phys. Rev. B*, **68**, 035411, Jul 2003. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.035411>.
- [51] Kaul, R. K., Ullmo, D., Chandrasekharan, S., Baranger, H. U. Mesoscopic Kondo problem. *EPL*, **71** (6), 973, 2005. URL <http://stacks.iop.org/0295-5075/71/i=6/a=973>.
- [52] Yoo, J., Chandrasekharan, S., Kaul, R. K., Ullmo, D., Baranger, H. U. Cluster algorithms for quantum impurity models and mesoscopic Kondo physics. *Phys. Rev. B*, **71**, 201309, May 2005. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.201309>.
- [53] Bomze, Y., Borzenets, I., Mebrahtu, H., Makarovski, A., Baranger, H. U., Finkelstein, G. Two-stage Kondo effect and Kondo-box level spectroscopy in a carbon nanotube. *Phys. Rev. B*, **82**, 161411, Oct 2010. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.161411>.
- [54] Kaul, R. K., Zaránd, G., Chandrasekharan, S., Ullmo, D., Baranger, H. U. Spectroscopy of the Kondo problem in a box. *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 176802, May 2006. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.176802>. 22
- [55] Žitko, R. Fano-Kondo effect in side-coupled double quantum dots at finite temperatures and the importance of two-stage Kondo screening. *Phys. Rev. B*, **81**, 115316, Mar 2010. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.115316>. 22, 30
- [56] Žitko, R., Bonča, J. Enhanced conductance through side-coupled double quantum dots. *Phys. Rev. B*, **73**, 035332, Jan 2006. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.035332>.
- [57] Yoshida, M., Oliveira, L. N. Thermoelectric effects in quantum dots. *Physica B*, **404** (19), 3312–3315, 2009. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452609006206>.
- [58] Tifrea, I., Crisan, M., Pal, G., Grosu, I. Electronic transport of a T-shaped double-quantum-dot system in the Coulomb blockade regime. *Eur. Phys. J. B*, **86** (3), 102, mar. 2013. URL <http://link.springer.com/10.1140/epjb/e2013-30567-8>. 22
- [59] Oreg, Y., Goldhaber-Gordon, D. Two-channel Kondo effect in a modified single electron transistor. *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 136602, Apr 2003. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.136602>. 22

- [60] Pustilnik, M., Borda, L., Glazman, L. I., von Delft, J. Quantum phase transition in a two-channel-Kondo quantum dot device. *Phys. Rev. B*, **69**, 115316, Mar 2004. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.115316>. 22
- [61] Aldea, A., Țolea, M., Dinu, I. V. Coulomb oscillations in the Fano-Kondo effect and zero-bias anomalies in a double-dot mesotransistor. *Phys. Rev. B*, **83**, 245317, Jun 2011. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.245317>. 22
- [62] Andrade, J. A., Cornaglia, P. S., Aligia, A. A. Transport through side-coupled multilevel double quantum dots in the Kondo regime. *Phys. Rev. B*, **89**, 115110, Mar 2014. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.115110>. 23
- [63] van der Wiel, W. G., De Franceschi, S., Elzerman, J. M., Fujisawa, T., Tarucha, S., Kouwenhoven, L. P. Electron transport through double quantum dots. *Rev. Mod. Phys.*, **75**, 1–22, Dec 2002. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.75.1>. 24, 25
- [64] Kastner, M. A. The single-electron transistor. *Rev. Mod. Phys.*, **64**, 849–858, Jul 1992. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.64.849>. 24
- [65] Kouwenhoven, L. P., Marcus, C. M., McEuen, P. L., Tarucha, S., Westervelt, R. M., Wingreen, N. S. Electron transport in quantum dots. En: L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven, G. Schön (eds.) *Mesoscopic Electron Transport*, págs. 105–214. New York: Kluwer, 1997.
- [66] Aleiner, I. L., Brouwer, P. W., Glazman, L. I. Quantum effects in the Coulomb blockade. *Phys. Rep.*, **358**, 309–440, 2002. URL [http://dx.doi.org/10.1016/S0370-1573\(01\)00063-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0370-1573(01)00063-1).
- [67] Alhassid, Y. The statistical theory of quantum dots. *Rev. Mod. Phys.*, **72**, 895–968, Oct 2000. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.72.895>. 24
- [68] Roch, N., Florens, S., Bouchiat, V., Wernsdorfer, W., Balestro, F. Quantum phase transition in a single-molecule quantum dot. *Nature*, **453** (7195), 633–7, mayo 2008. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nature06930>. 30, 43
- [69] Logan, D., Wright, C., Galpin, M. Correlated electron physics in two-level quantum dots: Phase transitions, transport, and experiment. *Phys. Rev. B*, **80** (12), 125117, sep. 2009. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.125117>. 53

- [70] Roura Bas, P., Aligia, A. A. Nonequilibrium transport through a singlet-triplet Anderson impurity. *Phys. Rev. B*, **80**, 035308, Jul 2009. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.035308>.
- [71] Roura Bas, P., Aligia, A. A. Nonequilibrium dynamics of a singlet-triplet Anderson impurity near the quantum phase transition. *J. Phys.: Condens. Matter*, **22** (2), 025602, ene. 2010. URL <http://iopscience.iop.org/0953-8984/22/2/025602>.
- [72] Žitko, R., Peters, R., Pruschke, T. Properties of anisotropic magnetic impurities on surfaces. *Phys. Rev. B*, **78**, 224404, Dec 2008. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.224404>.
- [73] Parks, J. J., Champagne, a. R., Costi, T. a., Shum, W. W., Pasupathy, a. N., Neuscamman, E., *et al.* Mechanical control of spin states in spin-1 molecules and the underscreened Kondo effect. *Science*, **328** (5984), 1370–3, jun. 2010. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/20538943>. 43
- [74] Cornaglia, P. S., Roura Bas, P., Aligia, A. A., Balseiro, C. A. Quantum transport through a stretched spin-1 molecule. *EPL*, **93** (4), 47005, Feb 2011. URL <http://iopscience.iop.org/0295-5075/93/4/47005/fulltext/>. 43
- [75] Florens, S., Freyn, A., Roch, N., Wernsdorfer, W., Balestro, F., Roura-Bas, P., *et al.* Universal transport signatures in two-electron molecular quantum dots: gate-tunable Hund’s rule, underscreened Kondo effect and quantum phase transitions. *J. Phys.: Condens. Matter*, **23** (24), 243202, 2011. URL <http://stacks.iop.org/0953-8984/23/i=24/a=243202>. 30, 43
- [76] Karrasch, C., Enss, T., Meden, V. Functional renormalization group approach to transport through correlated quantum dots. *Phys. Rev. B*, **73**, 235337, Jun 2006. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.235337>. 30
- [77] Schrieffer, J. R., Wolff, P. A. Relation between the Anderson and Kondo hamiltonians. *Phys. Rev.*, **149**, 491–492, Sep 1966. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.149.491>. 30, 35, 46
- [78] Torio, M. E., Hallberg, K., Ceccatto, A. H., Proetto, C. R. Kondo resonances and Fano antiresonances in transport through quantum dots. *Phys. Rev. B*, **65**, 085302, Jan 2002. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.085302>. 31
- [79] Tanaka, Y., Kawakami, N., Oguri, A. Crossover between two different Kondo couplings in side-coupled double quantum dots. *Phys. Rev. B*, **85**, 155314, Apr 2012. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.155314>. 31

- [80] Pines, D., Nozières, P. The theory of quantum liquids. Addison-Wesley, 1990. 43
- [81] Nozières, P., Blandin, A. Kondo effect in real metals. *J. Phys. France*, **41** (3), 193–211, 1980. URL <http://dx.doi.org/10.1051/jphys:01980004103019300>. 43
- [82] Coleman, P., Pépin, C. Singular Fermi liquid behavior in the underscreened Kondo model. *Phys. Rev. B*, **68**, 220405, Dec 2003. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.220405>.
- [83] Cabrera Cano, M., Florens, S. Magnetotransport in the Kondo model with ferromagnetic exchange interaction. *Phys. Rev. B*, **88**, 035104, Jul 2013. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.035104>. 43, 60
- [84] Sasaki, S., De Franceschi, S., Elzerman, J., Van der Wiel, W., Eto, M., Tarucha, S., *et al.* Kondo effect in an integer-spin quantum dot. *Nature*, **405** (6788), 764–767, 2000. URL <http://dx.doi.org/10.1038/35015509>. 43
- [85] Andrade, J. A., García, D. J., Cornaglia, P. S. Ferromagnetic and underscreened Kondo behavior in quantum dot arrays. *Phys. Rev. B*, **92**, 165416, Oct 2015. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.165416>. 44, 60
- [86] Lieb, E., Mattis, D. Ordering energy levels of interacting spin systems. *J. Math. Phys.*, **3** (4), 749–751, 1962. URL <http://dx.doi.org/10.1063/1.1724276>. 46
- [87] Merzbacher, E. Quantum Mechanics. John Willey and Sons Inc., New York, 1998. 48
- [88] Langreth, D. C. Friedel sum rule for Anderson’s model of localized impurity states. *Phys. Rev.*, **150** (2), 516, 1966. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRev.150.516>. 52
- [89] Abrikosov, A. A., Gorkov, L. P., Dzyaloshinski, I. E. Methods of quantum field theory in statistical physics. Courier Corporation, 1975. 52, 92
- [90] Logan, D. E., Tucker, A. P., Galpin, M. R. Common non-Fermi liquid phases in quantum impurity physics. *Phys. Rev. B*, **90**, 075150, Aug 2014. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.075150>. 53
- [91] Anderson, P. W. A poor man’s derivation of scaling laws for the Kondo problem. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **3** (12), 2436, 1970. URL <https://doi.org/10.1088/0022-3719/3/12/008>. 55

- [92] Tsvelick, A. M., Wiegmann, P. B. Exact results in the theory of magnetic alloys. *Adv. Phys.*, **32** (4), 453–713, 1983. URL <http://dx.doi.org/10.1080/00018738300101581>. 55
- [93] Furuya, K., Lowenstein, J. H. Bethe-ansatz approach to the Kondo model with arbitrary impurity spin. *Phys. Rev. B*, **25**, 5935–5952, May 1982. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.25.5935>.
- [94] Andrei, N., Furuya, K., Lowenstein, J. H. Solution of the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, **55**, 331–402, Apr 1983. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.55.331>. 55
- [95] Wolf, S., Awschalom, D., Buhrman, R., Daughton, J., Von Molnar, S., Roukes, M., *et al.* Spintronics: a spin-based electronics vision for the future. *Science*, **294** (5546), 1488–1495, 2001. URL <https://doi.org/10.1126/science.1065389>. 59
- [96] Žutić, I., Fabian, J., Das Sarma, S. Spintronics: Fundamentals and applications. *Rev. Mod. Phys.*, **76**, 323–410, Apr 2004. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.76.323>. 59
- [97] Kent, A. D., Worledge, D. C. A new spin on magnetic memories. *Nature nano.*, **10** (3), 187–191, 2015. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2015.24>. 59
- [98] Datta, S., Das, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Appl. Phys. Lett.*, **56** (7), 665–667, 1990. URL <http://dx.doi.org/10.1063/1.102730>. 59
- [99] Hatami, M., Bauer, G. E. W., Zhang, Q., Kelly, P. J. Thermal spin-transfer torque in magnetoelectronic devices. *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 066603, Aug 2007. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.066603>. 59
- [100] Torio, M., Hallberg, K., Flach, S., Miroshnichenko, A., Titov, M. Spin filters with Fano dots. *Eur. Phys. J. B*, **37** (3), 399–403, 2004. URL <http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2004-00072-6>. 60
- [101] Song, J., Ochiai, Y., Bird, J. Fano resonances in open quantum dots and their application as spin filters. *Appl. Phys. Lett.*, **82** (25), 4561–4563, 2003. URL <http://dx.doi.org/10.1063/1.1586788>.
- [102] Ojeda, J., Pacheco, M., Orellana, P. An array of quantum dots as a spin filter device by using Dicke and Fano effects. *Nanotechnology*, **20** (43), 434013, 2009. URL <http://stacks.iop.org/0957-4484/20/i=43/a=434013>. 60

- [103] Reddy, P., Jang, S.-Y., Segalman, R. A., Majumdar, A. Thermoelectricity in molecular junctions. *Science*, **315** (5818), 1568–1571, 2007. URL <https://doi.org/10.1126/science.1137149>. 60
- [104] Uchida, K., Takahashi, S., Harii, K., Ieda, J., Koshihara, W., Ando, K., *et al.* Observation of the spin Seebeck effect. *Nature*, **455** (7214), 778–781, 2008. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nature07321>. 60
- [105] Kubala, B., König, J., Pekola, J. Violation of the Wiedemann-Franz law in a single-electron transistor. *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 066801, Feb 2008. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.066801>. 60
- [106] Murphy, P., Mukerjee, S., Moore, J. Optimal thermoelectric figure of merit of a molecular junction. *Phys. Rev. B*, **78**, 161406, Oct 2008. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.161406>.
- [107] Finch, C. M., García-Suárez, V. M., Lambert, C. J. Giant thermopower and figure of merit in single-molecule devices. *Phys. Rev. B*, **79**, 033405, Jan 2009. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.033405>.
- [108] Costi, T. A., Zlatić, V. Thermoelectric transport through strongly correlated quantum dots. *Phys. Rev. B*, **81**, 235127, Jun 2010. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.235127>. 60
- [109] Wójcik, K. P., Weymann, I. Thermopower of strongly correlated T-shaped double quantum dots. *Phys. Rev. B*, **93**, 085428, Feb 2016. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.085428>.
- [110] Dubi, Y., Di Ventra, M. Colloquium: Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions. *Rev. Mod. Phys.*, **83**, 131–155, Mar 2011. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.83.131>.
- [111] Widawsky, J. R., Darancet, P., Neaton, J. B., Venkataraman, L. Simultaneous determination of conductance and thermopower of single molecule junctions. *Nano Letters*, **12** (1), 354–358, 2012. URL <http://dx.doi.org/10.1021/nl203634m>, PMID: 22128800.
- [112] Rejec, T., Žitko, R., Mravlje, J., Ramšak, A. Spin thermopower in interacting quantum dots. *Phys. Rev. B*, **85**, 085117, Feb 2012. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.085117>. 60
- [113] Roura-Bas, P., Tosi, L., Aligia, A. A., Cornaglia, P. S. Thermopower of an SU(4) Kondo resonance under an SU(2) symmetry-breaking field. *Phys. Rev.*

- B*, **86**, 165106, Oct 2012. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.165106>. 60
- [114] Mahan, G., Sofo, J. The best thermoelectric. *PNAS*, **93** (15), 7436–7439, 1996. URL <http://www.pnas.org/content/93/15/7436.abstract>. 60
- [115] Lim, J. S., López, R., Sánchez, D. Orbital caloritronic transport in strongly interacting quantum dots. *New J. Phys.*, **16** (1), 015003, 2014. URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/16/i=1/a=015003>. 60
- [116] Žitko, R., Mravlje, J., Ramšak, A., Rejec, T. Spin thermopower in the overscreened Kondo model. *New J. Phys.*, **15** (10), 105023, 2013. URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/15/i=10/a=105023>. 60
- [117] Tooski, S., Ramšak, A., Buřka, B. Reprint of : Regular and singular Fermi liquid in triple quantum dots: Coherent transport studies. *Physica E: Low Dimens. Syst. Nanostruct.*, **82**, 366 – 373, 2016. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947716304222>, frontiers in quantum electronic transport - In memory of Markus Büttiker. 60
- [118] Andrade, J. A., Cornaglia, P. S. Spin filtering and thermopower in star-coupled quantum dot devices. *Phys. Rev. B*, **94**, 235112, Dec 2016. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.235112>. 60
- [119] Atatüre, M., Dreiser, J., Badolato, A., Högele, A., Karrai, K., Imamoglu, A. Quantum-dot spin-state preparation with near-unity fidelity. *Science*, **312** (5773), 551, 2006. URL <http://dx.doi.org/10.1126/science.1126074>. 69, 72
- [120] Greilich, A., Oulton, R., Zhukov, E. A., Yugova, I. A., Yakovlev, D. R., Bayer, M., *et al.* Optical control of spin coherence in singly charged (In, Ga)As/GaAs quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 227401, Jun 2006. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.227401>.
- [121] Berezovsky, J., Mikkelsen, M. H., Stoltz, N. G., Coldren, L. A., Awschalom, D. D. Picosecond coherent optical manipulation of a single electron spin in a quantum dot. *Science*, **320** (5874), 349, 2008. URL <http://dx.doi.org/10.1126/science.1154798>. 69
- [122] Mackowski, S., Gurung, T., Jackson, H. E., Smith, L. M., Karczewski, G., Kossut, J. Exciton-controlled magnetization in single magnetic quantum dots. *Appl. Phys. Lett.*, **87** (7), 072502, 2005. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/87/7/10.1063/1.2011785>. 69

- [123] Korkusinski, M., Hawrylak, P. Optical signatures of spin polarization of carriers in quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, **101**, 027205, Jul 2008. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.027205>. 69
- [124] Reiter, D. E., Kuhn, T., Axt, V. M. All-optical spin manipulation of a single manganese atom in a quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 177403, Apr 2009. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.177403>. 69
- [125] Warburton, R. J., Schafflein, C., Haft, D., Bickel, F., Lorke, A., Karrai, K., *et al.* Optical emission from a charge-tunable quantum ring. *Nature*, **405**, 926, 2000. URL <http://dx.doi.org/10.1038/35016030>. 69
- [126] Högele, A., Seidl, S., Kroner, M., Karrai, K., Warburton, R. J., Gerardot, B. D., *et al.* Voltage-controlled optics of a quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 217401, Nov 2004. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.217401>.
- [127] Smith, J. M., Dalgarno, P. A., Warburton, R. J., Govorov, A. O., Karrai, K., Gerardot, B. D., *et al.* Voltage control of the spin dynamics of an exciton in a semiconductor quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, **94**, 197402, May 2005. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.197402>. 69
- [128] Dalgarno, P. A., Ediger, M., Gerardot, B. D., Smith, J. M., Seidl, S., Kroner, M., *et al.* Optically induced hybridization of a quantum dot state with a filled continuum. *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 176801, Apr 2008. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.176801>. 69, 70, 73
- [129] Cao, S., Tang, J., Sun, Y., Peng, K., Gao, Y., Zhao, Y., *et al.* Observation of coupling between zero- and two-dimensional semiconductor systems based on anomalous diamagnetic effects. *Nano Research*, **9**, 306–316, 2016. URL <http://dx.doi.org/10.1007/s12274-015-0910-z>.
- [130] Helmes, R. W., Sindel, M., Borda, L., von Delft, J. Absorption and emission in quantum dots: Fermi surface effects of Anderson excitons. *Phys. Rev. B*, **72**, 125301, Sep 2005. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.125301>. 69, 70
- [131] Türeci, H. E., Hanl, M., Claassen, M., Weichselbaum, A., Hecht, T., Braunecker, B., *et al.* Many-body dynamics of exciton creation in a quantum dot by optical absorption: A quantum quench towards Kondo correlations. *Phys. Rev. Lett.*, **106**, 107402, Mar 2011. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.107402>. 70, 78, 88

- [132] Latta, C., Haupt, F., Hanl, M., Weichselbaum, A., Claassen, M., Wuester, W., *et al.* Quantum quench of Kondo correlations in optical absorption. *Nature*, **474**, 627–630, 2011. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nature10204>. 69, 70, 75, 78, 79
- [133] Hilario, L. M. L., Aligia, A. A. Photoluminescence of a quantum dot hybridized with a continuum of extended states. *Phys. Rev. Lett.*, **103**, 156802, Oct 2009. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.156802>. 70, 76
- [134] Nordlander, P., Pustilnik, M., Meir, Y., Wingreen, N. S., Langreth, D. C. How long does it take for the Kondo effect to develop? *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 808–811, Jul 1999. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.83.808>. 70
- [135] Heyl, M., Kehrein, S. Crooks relation in optical spectra: Universality in work distributions for weak local quenches. *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 190601, May 2012. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.190601>.
- [136] Vasseur, R., Trinh, K., Haas, S., Saleur, H. Crossover physics in the nonequilibrium dynamics of quenched quantum impurity systems. *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 240601, Jun 2013. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.240601>.
- [137] Lukyanov, S. L., Saleur, H., Jacobsen, J. L., Vasseur, R. Exact overlaps in the Kondo problem. *Phys. Rev. Lett.*, **114**, 080601, Feb 2015. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.080601>.
- [138] Antipov, A. E., Dong, Q., Gull, E. Voltage quench dynamics of a Kondo system. *Phys. Rev. Lett.*, **116**, 036801, Jan 2016. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.116.036801>. 70
- [139] Cornaglia, P. S., Georges, A. Theory of core-level photoemission and the x-ray edge singularity across the Mott transition. *Phys. Rev. B*, **75**, 115112, Mar 2007. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.115112>. 70, 75
- [140] Andrade, J. A., Aligia, A. A., Cornaglia, P. S. Many-body dynamics of the decay of excitons of different charges in a quantum dot. *Phys. Rev. B*, **94**, 235109, Dec 2016. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.235109>. 70
- [141] Ternes, M. Spin excitations and correlations in scanning tunneling spectroscopy. *arXiv preprint arXiv:1505.04430*, 2015. 86
- [142] Coqblin, B., Schrieffer, J. R. Exchange interaction in alloys with cerium impurities. *Phys. Rev.*, **185**, 847–853, Sep 1969. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.185.847>. 95

-
- [143] Zubarev, D. N. Double-time green functions in statistical physics. *Soviet Physics Uspekhi*, **3** (3), 320, 1960. URL <http://stacks.iop.org/0038-5670/3/i=3/a=R02>. 96
- [144] Coleman, P. Introduction to many body physics. Rutgers University, New Jersey, 2012. 100, 101

Publicaciones asociadas

1. J. A. Andrade, Pablo S. Cornaglia and A. A. Aligia. Transport through side-coupled multilevel double quantum dots in the Kondo regime. *Phys. Rev. B* 89, 115110, (2014).
2. J. A. Andrade, D. J. García and Pablo S. Cornaglia. Ferromagnetic and underscreened Kondo behavior in quantum dot arrays. *Phys. Rev. B* 92, 165416, (2015).
3. J. A. Andrade and Pablo S. Cornaglia. Spin filtering and thermopower in star coupled quantum dot devices. *Phys. Rev. B* 94, 235112 (2016).
4. J. A. Andrade, A. A. Aligia and Pablo S. Cornaglia. Many-body dynamics of exciton and trion decay in a quantum dot. *Phys. Rev. B* 94, 235109 (2016).

Agradecimientos

Esta tesis doctoral, ha sido el fruto de la dedicación y entrega no solo de su autor y su director, sino también del acompañamiento y colaboración permanente de cada una de las personas que citaré a continuación:

A Dios, por fortalecer mi alma e iluminar cada uno de mis pasos.

A mi querida esposa Clairen y mi adorada hija Maria Camila, por toda la felicidad que me brindan ,la fortaleza de mi día a día y ser el motor de mi vida.

A mi papá y mi abuela, quienes siempre han estado presentes y me han apoyado en cada uno de mis proyectos de vida. A mi mamá por su acompañamiento desde la distancia. A mis hermanos y demás familiares de quienes siempre he recibido una voz de aliento.

A mi director Dr. Pablo Cornaglia, por la paciencia, carisma y el apoyo incondicional que me ha brindado durante el desarrollo de este trabajo, como también por orientarme a tener mayor comprensión de la física en diversos sistemas; al Dr. Armando Aligia, por su voto de confianza al llegar al instituto Balseiro y quien junto a Pablo siempre tuvieron gran interés en mi formación profesional.

A los colaboradores de esta tesis, Dr. Armando Aligia y Dr. Daniel García.

Al grupo de teoría de la materia condensada por recibirme en su equipo de trabajo, por cada unas de las experiencias académicas y personales vividas.

A mis profesores, compañeros posdoctorandos, doctorandos, y estudiantes de maestría con quien he compartido vivencias y han sido partícipes de mi formación personal y académica.

Finalmente al CONICET por la oportunidad y el financiamiento mediante la concesión de una beca de doctorado.

